



Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline

C Gérard

► To cite this version:

C Gérard. Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline. Mécanique [physics.med-ph]. Université Paris-Nord - Paris XIII, 2008. Français. NNT: . tel-00315792

HAL Id: tel-00315792

<https://theses.hal.science/tel-00315792>

Submitted on 1 Sep 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITE PARIS 13 - PARIS NORD
INSTITUT GALILEE

THESE

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université Paris 13
Spécialité « Mécanique, option Matériaux »

présentée et soutenue publiquement par

Céline GERARD

le 25 avril 2008

Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline

Directeur de thèse : G. CAILLETAUD

Philippe BOMPARD	Professeur, Ecole Centrale de Paris	Président
Véronique FAVIER	Docteur HdR, ENSAM Paris	Rapporteur
Philippe PILVIN	Professeur, Université de Bretagne-Sud	Rapporteur
Brigitte BACROIX	Directrice de Recherche CNRS, Université Paris 13	Examinatrice
Michel BORNERT	Docteur, Ecole Polytechnique	Examineur
Georges CAILLETAUD	Professeur, Mines Paris - Paristech	Examineur
Colette REY	Professeur, Université Paris 13	Examinatrice
Siegfried SCHMAUDER	Professeur, IMWF Universität Stuttgart	Examineur
Rénald BRENNER	Docteur, Université Paris 13	Invité
Sylvain LECLERCQ	Docteur HdR, EDF R&D	Invité

UNIVERSITE PARIS 13 - PARIS NORD
INSTITUT GALILEE

THESE

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université Paris 13
Spécialité « Mécanique, option Matériaux »

présentée et soutenue publiquement par

Céline GERARD

le 25 avril 2008

Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline

Directeur de thèse : G. CAILLETAUD

Philippe BOMPARD	Professeur, Ecole Centrale de Paris	Président
Véronique FAVIER	Docteur HdR, ENSAM Paris	Rapporteur
Philippe PILVIN	Professeur, Université de Bretagne-Sud	Rapporteur
Brigitte BACROIX	Directrice de Recherche CNRS, Université Paris 13	Examinatrice
Michel BORNERT	Docteur, Ecole Polytechnique	Examineur
Georges CAILLETAUD	Professeur, Mines Paris - Paristech	Examineur
Colette REY	Professeur, Université Paris 13	Examinatrice
Siegfried SCHMAUDER	Professeur, IMWF Universität Stuttgart	Examineur
Rénald BRENNER	Docteur, Université Paris 13	Invité
Sylvain LECLERCQ	Docteur HdR, EDF R&D	Invité

*A Jean-Pierre Caruelle,
qui m'a accueillie ...
au printemps 1995.*

*« La science a-t-elle promis le bonheur ?
Je ne le crois pas. Elle a promis la vérité,
et la question est de savoir si l'on fera jamais du
bonheur avec de la vérité. »
Emile Zola, 1840-1902*

Remerciements

*L'*aboutissement de ce Doctorat est avant tout le fruit d'un parcours jalonné, comme tant d'autres, de nombreuses rencontres. Celles-ci ont permis, années après années, l'élaboration et l'enrichissement d'un projet qui s'accompagne, bien au delà du scientifique, d'un choix de vie. Pleinement consciente de la chance extraordinaire dont j'ai bénéficié, je voudrais profiter de la page qui m'est ici offerte pour remercier en toute sincérité les personnages les plus marquants de cette trajectoire.

*L'*a première rencontre avec l'univers de la science, si l'on en exclut momentanément mes parents, a été celle du Professeur Germain. Parler du très grand scientifique est assurément un pléonasme... mais à 3 ans et un peu plus, je dois confesser que le principe des puissances virtuelles, la mécanique, et toute la science étaient bien loin de mes préoccupations ! Enfant, j'étais simplement fascinée par la générosité et la grandeur humaine dont vous rayonniez, Professeur. Ainsi, le premier idéal de la recherche que j'ai construit était celui du "Professeur avec un grand P", qui allie Sciences et Humanité. Merci, Professeur, de ce très beau cadeau.

*D'*ix ans après... ma décision était prise : je voulais être chercheur. Je dois aux Professeurs Jean-Pierre et Danièle Caruelle de m'avoir alors accueillie au CRRET pour mon tout premier stage, et d'avoir ainsi largement conforté mon choix. Je retiendrai de vous, Danièle, votre patience et votre extraordinaire pédagogie, lorsque vous m'expliquiez l'étude de la protéine HARP alors que j'étais encore au collège ! Avec Jean Delbé, vous m'avez également inculqué, et le mot est faible, toute l'importance du travail en équipe. Notion si précieuse en recherche... Combien de fois n'y ai-je pas repensé au cours de cette thèse. Jean-Pierre, vous avez été pour moi le relais du Professeur Germain, associant savoir, brio, et générosité. Merci de la confiance que vous m'avez accordée si tôt, et de vos encouragements renouvelés plusieurs années après. Je n'aurais jamais imaginé ce 25 avril sans votre présence.

En 2003, a commencé pour moi la mécanique. C'était l'époque du DEA « Mécanique et Matériaux ». Je crois que tous les anciens de « MM » en gardent un souvenir fort.

Cette année-là, MM. Pineau et Zaoui ont eu un rôle-clé dans mon itinéraire. C'est en effet auprès d'eux que j'ai cherché conseils pour le choix de mon « entrée en thèse ». L'un m'a proposé un Directeur de thèse répondant à mes attentes, l'autre un sujet, des laboratoires, un environnement. Du sur-mesure !

Je souhaiterais adresser à ces deux Professeurs (avec un grand P !) toute ma reconnaissance pour leurs précieux conseils, leur disponibilité et leur écoute attentive.

À mon sens, la thèse (la recherche ?) est avant tout une histoire d'équipe. Le rôle du Directeur et des encadrants s'en trouve bien souvent être essentiel à la qualité de son déroulement : il en a été ainsi de cette thèse.

Parmi ces Professeurs qui m'ont permis de forger mes choix, Georges Cailletaud occupe une place toute particulière. Avec cette chaleur humaine qui vous caractérise, vous m'avez ouvert votre porte, m'offrant ainsi une relation personnelle d'une grande richesse. Chaque thèse est une aventure. Celle-ci, fédérative, demandait parfois quelques dons d'équilibristes. En en assurant la direction, vous avez été un guide audacieux et si disponible, toujours présent et très réactif, lançant sans cesse de nouveaux défis, tout en cultivant continuellement le consensus. Enfin, vous avez introduit dans cette aventure une dose considérable d'humanité, et elle en avait bien besoin ! Un GRAND merci pour ce parcours... qu'il ne s'arrête surtout pas là !

Je tiens également à remercier Brigitte Bacroix pour son « fair-play », ses positions constructives, son rôle fédérateur. Votre pragmatisme et votre modération constante de la gîte du navire ont été précieux.

Avoir Michel Bornert dans son encadrement est un atout certain. Dommage qu'il m'ait fallu un peu de temps pour trouver la « longueur d'onde » de la communication sereine. J'espère véritablement, au-delà de cette thèse, pouvoir encore bénéficier de votre sens du détail, et de l'amplitude de votre champ d'action.

Que Jérôme Crépin, au LMS, et Renald Brenner, au LPMTM, soient également remerciés pour leur soutien respectif.

Enfin, je souhaite à bien des thésards un partenaire industriel qui, comme Sylvain Leclercq, pour le compte d'EDF, fait preuve de souplesse, de compréhension et d'ouverture. Merci également, Sylvain, pour la qualité de nos échanges. Ils ont certes été peu nombreux, mais néanmoins fructueux.

Parce qu'une thèse est plus prosaïquement faite d'expérimentations et de calculs, de beaucoup d'essais et de quelques réussites, je voudrais saluer ici ceux qui les ont partagés au plus près : Daniel Caldemaison, Thierry Chauveau, Jean-Laurent Dourmaux, Pascale Hennion, Franck N'Guyen, Valérie Mounoury et Grégory Sainte-Luce. Sans rien avoir choisi du fonctionnement si particulier de cette thèse, vous avez accepté d'en jouer pleinement le jeu, et toujours avec le sourire de surcroît. Un grand merci donc à cette fine équipe, ce fut un grand plaisir de partager avec vous le quotidien de ces trois années.

Se travail s'est effectué au sein de trois laboratoires. Que leur(s) directeur(s) respectif(s) soient ici remerciés de leur accueil : Brigitte Bacroix, puis Patrick Franciosi pour le Laboratoire des Propriétés Mécaniques et Thermodynamiques des Matériaux, Jean-Pierre Trottier, puis Esteban P. Busso pour le Centre des Matériaux, et Bernard Halphen pour le Laboratoire de Mécanique des Solides.

Par ailleurs, je voudrais également remercier ceux qui ont apporté un rayon de soleil les jours de pluie. Je renonce faiblement à l'ambition d'être ici exhaustive : avec trois laboratoires la tâche est (trop) rude. Que ceux qui ne trouveraient pas ici leur nom n'en prennent pas ombrage... la place fait défaut ! Je me contenterai donc de citer brièvement : André Zaoui, Jean Salençon, Jean Raphanel, Alexandre Dimanov, Andrei Constantinescu, Aurélie Wauthier, Anis Aouafi, Hélène Réglé, le « bureau russe », Clara Panait, Ibrahima Gueye, Aurélie Jean, Arnaud Longuet, Marc Blétry, Odile Adam, Nikolay Osipov, Farida Azzouz, Stephane Quilici, Samuel Forest, Jacques Besson, Pierre Gilormini, Béatrice Desoudin, et plus largement les équipes « Microméca », « Cocas », « Cal », « Val », et « Prim ».

Sur la ligne d'arrivée, la chance et l'honneur d'un jury d'exception. Je voudrais lui exprimer toute ma gratitude pour avoir bien voulu porter attention à ce travail. Je souhaiterais particulièrement remercier Philippe Bompard d'en avoir exercé la présidence, et surtout de l'intérêt porté à cette thèse depuis son commencement.

Véronique Favier et Philippe Pilvin ont eu la lourde tâche de rapporter en un temps très court. Merci à Véronique Favier pour son éclairage et sa très grande compréhension. Grand merci à Philippe Pilvin de m'avoir fait bénéficier de son expertise au travers de nos nombreux échanges et de ses judicieux conseils. J'ai beaucoup appris en peu de temps. J'aimerais qu'il s'agisse là de l'amorce d'un travail plus ambitieux.

Merci également à Colette Rey, ainsi qu'à Siegfried Schmauder de leur présence et de leur apport respectif. Thanks a lot Professor for all interesting exchanges we had at IWCM16 and 17, and more informally in Paris. I sincerely hope to have new opportunities.

Parce que ces remerciements-là ne s'inscrivent dans aucune chronologie, je les ai gardés pour la fin ... Un immense merci à mes proches, ma famille et mes amis pour avoir fait preuve à chaque instant d'une compréhension et d'une patience hors du commun, de m'avoir accordé sans réserve leur total soutien.

Cette thèse est avant tout le fruit d'un énorme sacrifice commun. Ils en ont enduré le quotidien sans jamais faiblir. Il n'y a pas de mots assez fort pour dire toute ma reconnaissance et mon amour à Maman et Papa.

*Le 4 juillet 2008, dans un avion ...
quelque part entre l'est et l'ouest de la planète,
Céline.*

Avant-propos

AVANT d'entrer dans le vif du sujet, nous nous devons de présenter ici le contexte quelque peu particulier de cette thèse. Plus que toute autre, elle aura été celle de la « mise en œuvre conjointe ». Née de la Fédération Francilienne de Mécanique des Matériaux, Structures et Procédés (F2Mmsp), commanditaire fédératif et audacieux, elle s'est déroulée dans trois laboratoires d'accueil :

- le Laboratoire des Propriétés Mécaniques et Thermodynamiques des Matériaux de l'Université Paris 13,
- le Laboratoire de Mécanique des Solides de l'Ecole Polytechnique,
- le Centre des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris.

Scientifiquement et financièrement, cette étude relève également d'un partenariat entre le CNRS et EDF, avec le soutien de son département Mécanique et Matériaux des Composants. Ainsi,

- la base de données expérimentales concernant le phénomène du rochet sur inox 316L a été fournie par EDF,
- la caractérisation du cuivre s'est effectuée pour partie au LPMTM (mesures DRX), pour partie au LMS (caractérisation microstructurale),
- certains usinages proviennent de l'atelier du Centre des Matériaux (électro-érosion au fil), d'autres de celui du LMS,
- la première étape des chargements a été réalisée au LPMTM (pré-cisaillement ou pré-laminage), la seconde au LMS (cyclage *in-situ*),
- les calculs éléments finis ont été conduits au Centre des Matériaux,
- les approches en champs moyens partagées entre le Centre des Matériaux, le LPMTM et le LMS ...

et l'ensemble des résultats débattus et analysés, dans les laboratoires ou en réunion générale, avec : Brigitte Bacroix, Rénald Brenner, Michel Bornert, Jérôme Crépin, Samuel Forest, Sylvain Leclercq (Encadrants), et Georges Cailletaud (Directeur de thèse).

Présentons donc tout d'abord les parties en présence ... la Fédération bien sûr, mais aussi PERFECT, IVA et PHONON, les trois projets dont relève cette thèse.

La Fédération Francilienne de Mécanique des Matériaux, Structures et Procédés.

Placée sous l'égide du CNRS, la F2Mmsp associe par convention deux universités, deux établissements de recherche, et six écoles d'ingénieurs, soit une vingtaine de laboratoires de recherche. Elle a, notamment, pour objectifs :

- de renforcer et valoriser le potentiel scientifique de ce groupement, et d'en améliorer la visibilité régionale, nationale et internationale ;
- de répondre, en les anticipant, aux besoins scientifiques de l'industrie en matière d'utilisation de matériaux, et de conception des structures.

La préoccupation scientifique est donc de concevoir et de mettre en œuvre des approches multi-échelles des propriétés et des réponses mécaniques - multiphysiques, tant pour les composants que pour les systèmes et les procédés. Cette démarche doit être initiée à la fois du point de vue de la modélisation, de la simulation, et de l'expérimentation aux fins de rapprocher dans ces divers domaines les aspects matériaux, structures et procédés.

IVA et PHONON sont deux projets coordonnés par la Fédération Francilienne de Mécanique des Matériaux, Structures et Procédés.

Le projet Identification et Validation par mesures de champs (IVA) vise à progresser sur trois plans :

- développer les méthodologies d'inversion adaptées aux très larges possibilités ouvertes par les mesures de champs,
- disposer d'approches inverses pour l'identification de modèles stochastiques,
- progresser quant à la validation d'un modèle par rapport à des critères d'erreur prédéfinis, question actuellement encore ouverte.

Les principales équipes impliquées sont issues des laboratoires LMS (Ecole Polytechnique), LMT (Ecole Normale Supérieure de Cachan), LPMTM (Université Paris 13), LMSSMat (Ecole Centrale de Paris), DMSE (ONERA).

Le projet Plasticité et HOMogénéisation NON linéaire (PHONON) s'intéresse :

- au développement de modèles à champs moyens intégrant les fluctuations des champs mécaniques au sein des phases constitutives,
- à la recherche de formulations plus performantes pour le traitement de situations dans lesquelles les comportements locaux sont complexes,
- à la notion de volume élémentaire représentatif et à l'analyse des liens entre son extension et la nature du comportement effectif.

Les principales équipes impliquées sont issues des laboratoires LMS (Ecole Polytechnique), Centre des Matériaux (Mines Paris), LMSSMat (Ecole Centrale de Paris), LMT (Ecole Normale Supérieure de Cachan), LIM (Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers), LPMTM (Université Paris 13), LMSGC (Ecole Nationale des Ponts et Chaussées), LaM (Université de Marne-la-Vallée).

Le projet européen PERFECT

PERFECT a pour objectif de prévoir, avec une précision accrue, l'évolution dans le temps des matériaux des réacteurs nucléaires, par le développement d'un ensemble d'outils de simulation numérique depuis l'échelle *ab initio* jusqu'à celle des cuves de réacteurs sous pression. Coordonné par EDF et approuvé par la Commission Européenne, ce projet rassemble vingt-huit partenaires (douze organisations nucléaires, seize universités ou centres de recherche) provenant de douze pays européens. Son budget global pour quatre ans est de 18 millions d'euros, dont 7,5 financés par la Commission Européenne dans le cadre de son programme EURATOM.

PERFECT se subdivise en quatre sous-projets :

- *"Integration platform"*, qui coordonne l'ensemble des outils numériques et leur développement,
- *"Physic Modelling"*, dont l'objectif est de fournir des modèles multi-échelles des microstructures après radiation, expérimentalement validés, ainsi que les simulations par Dynamique des Dislocations associées,
- *"RPV Mechanics"* (RPV pour *"Reactor Pressure Vessel"*), qui doit définir le comportement en plasticité et rupture des matériaux irradiés, depuis l'échelle de la plasticité cristalline issue des modélisations par Dynamique des Dislocations, jusqu'au niveau des éprouvettes, voire des composants à l'échelle macroscopique,
- *"Internal Mechanics and Corrosion"*, qui vise à créer et vérifier un code de prédiction du comportement de la partie interne des réacteurs, en tenant compte des limites de durée de vie imposées par l'endommagement dû à la corrosion sous contrainte assistée de l'irradiation.

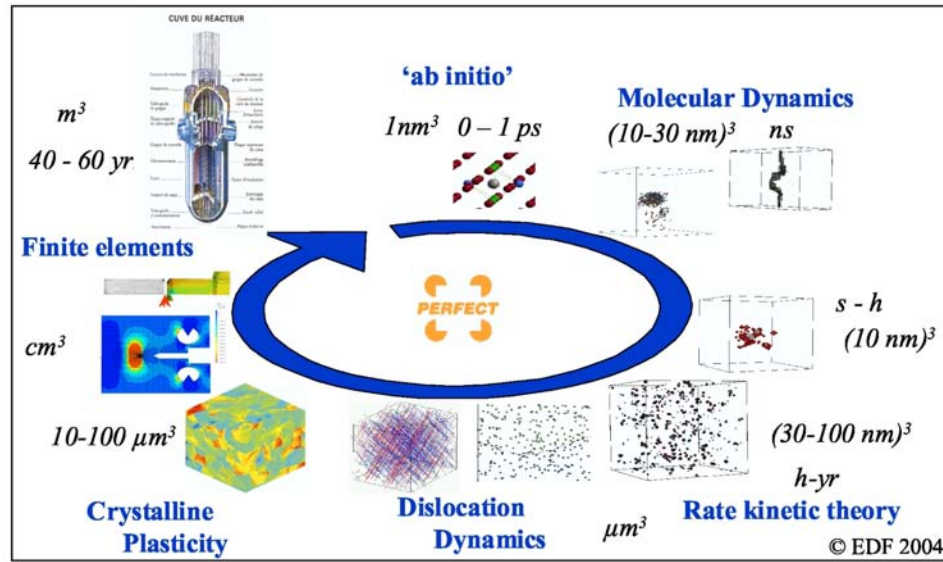


FIG. 1 – Modélisation multi-échelle : des atomes individuels à la cuve de réacteur.
[Baron et le PERFECT Consortium, 2004]

Introduction

« Οὐ πολλοῦ δέω χάριν ἔχειν, ὧ βουλὴ, τῷ κατηγορῶ, ὅτι μοι παρασκεύασε τὸν ἀγῶνα τουτονί. Πρότερον γὰρ οὐκ ἔχων πρόφασιν ἐφ’ ἧς τοῦ βίου λόγον δοίην, νυνὶ διὰ τοῦτον εἴληφα. »¹
Lysias (440-380 av. J.-C.), *Pour l’Invalide*.

DEPUIS quelques années, les travaux de recherche menés en vue de la description du comportement plastique de matériaux polycristallins connaissent un nouvel essor. En effet, cette thématique bénéficie actuellement de la convergence des développements des moyens d’analyse expérimentaux (microextensométrie, EBSD, diffraction) et des outils de simulation (calculs d’agrégats polycristallins, homogénéisation non linéaire) vers une description de plus en plus fine de la microstructure et des hétérogénéités de champs mécaniques. Pour autant, la mise en œuvre conjointe et la comparaison de ces différentes approches n’avaient pas été réalisées. Cette démarche apparaît comme potentiellement très riche tant pour la détermination de la loi de comportement monocristalline que pour l’évaluation de la pertinence des différents modèles.

Par ailleurs, l’intérêt des approches multi-échelles n’est plus à démontrer. La volonté de mieux prendre en compte la microstructure des matériaux, d’introduire des paramètres caractéristiques (morphologie, fractions volumiques, texture etc.), permet d’accroître le caractère prédictif des modèles, et donc d’aboutir d’un point de vue industriel à une meilleure transférabilité des propriétés mécaniques entre l’éprouvette et la structure. Si la simulation des procédés de mise en forme à partir de simulations atomiques relève encore du futur, la prédiction du comportement d’un volume élémentaire représentatif à partir de résultats de dynamique des dislocations est accessible. Cependant, de nombreuses hypothèses restent à valider. A titre d’exemple, la description de l’écrouissage latent souffre toujours d’une quantification plus qu’incertaine des interactions entre systèmes de glissement. A l’autre bout de l’échelle d’étude que nous nous accordons, des chargements complexes tels que le chargement orthogonal ou les phénomènes de rochet sont encore mal décrits macroscopiquement, et quasi inconnus aux échelles plus fines.

¹ « Pour un peu, citoyens du Conseil, je remerciais mon accusateur de m’avoir intenté ce procès : jusqu’ici, je n’avais pas eu l’occasion de rendre compte de ma conduite ; il me la fournit aujourd’hui. »

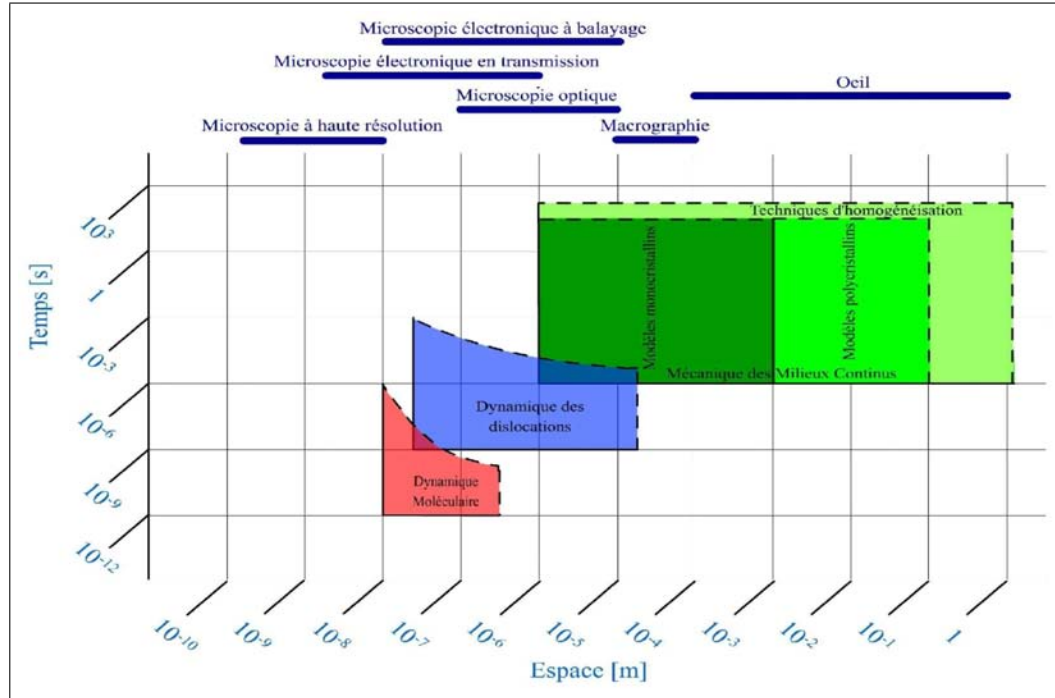


FIG. 2 – Représentation schématique des possibilités de simuler et d’observer le comportement plastique d’un volume de matière de taille donnée pendant un temps physique (dans le cas des simulations dynamiques). Les frontières tracées en traits pleins représentent les limites de validité des modèles. Les pointillés montrent les limites actuelles imposées par la puissance des calculateurs. [Fivel, 2006].

Tout l’enjeu du travail ici présenté est donc de développer une démarche *multi-échelles* MULTI-APPROCHES. Son objectif est double :

- l’enrichissement global de la démarche par la complémentarité des résultats, ce qui présentement sera illustré au cours des chapitres 2 et 4 ;
- la confrontation, voire l’évaluation, de (certains) modèles, comme il est présenté au chapitre 6.

L’enjeu industriel se pose en terme de modélisation de la plasticité sous des chargements complexes tels que le phénomène du rochet. Ce dernier apparaît lors de chargements cycliques à contrainte moyenne non nulle. Récurent lors des phases transitoires de fonctionnement des réacteurs, il est dangereux par son caractère insidieux : il peut conduire à la ruine de la structure par déformation progressive sans qu’aucun des seuils usuellement définis ne soit atteint. De nombreuses études ont été menées sur le sujet, particulièrement dans les années 70-80, à l’époque de Phénix et Superphénix. La base de données expérimentales disponible est riche et la déformation progressive désormais bien caractérisée. Les modélisations élaborées ne sont pas moins nombreuses, pour autant, la représentation, et donc la prévision, du comportement reste incertaine : soit l’accroissement de déformation n’est pas pris en compte, soit il est surestimé.

La démarche ici retenue se veut progressive tant dans la complexité des chargements étudiés que pour l'échelle d'approche. L'idée maîtresse est en effet de décomposer autant que possible la description du comportement sous chargements complexes en sous-problèmes. Ainsi le point de départ est fixé au système de glissement sous chargements monotones (cisaillement, traction), et leurs composés.

Dans un second temps, les chargements cycliques sont adjoints à l'étude. De même une seconde échelle d'analyse est introduite. Intermédiaire entre le monocristal et le volume élémentaire représentatif, se limitant donc à une longueur caractéristique de quelques grains, elle nous permettra de nous focaliser sur la localisation de la déformation en surface. Nous l'appellerons par la suite « mésoscopique ».

Enfin, la démarche multi-approches développée nous permet de confronter plusieurs descriptions du comportement au niveau du polycristal.

Le plan adopté dans ce manuscrit reflète la progression décrite ci-dessus.

- La *partie I* rapporte l'étude menée sur la description quantitative de l'écrouissage latent dans les modèles monocristallins. Des essais menés sous compositions de chargements monotones nous permettent de nous appuyer sur une référence expérimentale. Une méthode d'identification par calculs éléments finis sur élément de volume dépourvu de surface est développée. Enfin, les résultats obtenus sont confrontés à l'aide de différents modèles d'homogénéisation afin d'acquérir une certaine indépendance de l'identification vis-à-vis de la transition d'échelles employée. Deux lois monocristallines sont étudiées : l'une quasi-physique, l'autre phénoménologique cristalline.
- La *partie II* est le lieu d'une analyse de la localisation de la déformation en surface et de son évolution selon et au cours des chargements. Les chargements cycliques sont ici introduits. Les mesures de champs effectuées lors d'essais *in situ* donnent accès à une caractérisation à différents stades. Les cartographies EBSD des zones étudiées permettent de développer des microstructures représentatives et donc de confronter les champs obtenus expérimentalement et par calculs éléments finis.
- La *partie III* donne une évaluation numérique de plusieurs modèles à champs moyens en regard d'une approche éléments finis par calculs périodiques, eux-mêmes préalablement « disséqués » quant à leur représentativité par grains. Cette évaluation est effectuée en moyenne par phase, la phase étant ici considérée comme une orientation cristallographique, et en moyenne sur le volume élémentaire représentatif (VER).

Développer une démarche *multi-échelles* MULTI-APPROCHES conduit à des connections quasi « tri-dimensionnelles » difficiles à rendre dans un mémoire fatalement « inscrit dans le plan »

... Le lecteur voudra bien excuser l'inévitable gymnastique des renvois entre chapitres.

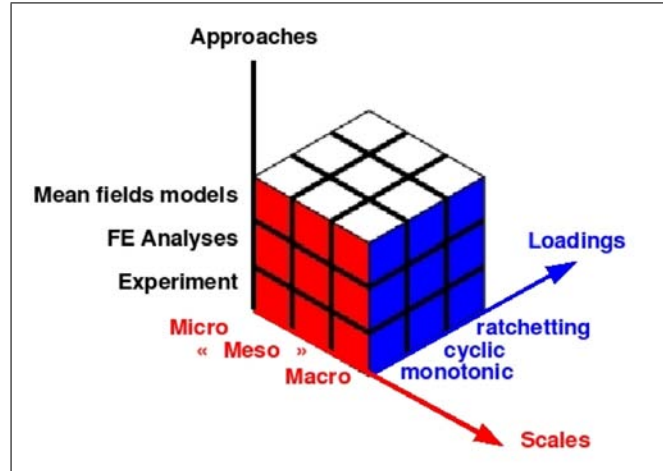


FIG. 3 – Il eût été intéressant de pouvoir écrire ce manuscrit en trois dimensions : l'axe x pour les échelles, l'y pour les chargements, et le z pour l'approche utilisée. Cette mise en œuvre n'étant pas encore à l'ordre du jour, il a bien fallu se résoudre à en choisir un ... La progression des échelles a ici été privilégiée : systèmes de glissement pour la première partie, la bande de localisation dans la seconde, et enfin le VER.

Première partie

Le monocrystal

Chapitre 1

Analyse bibliographique

« M. Arago avait une anecdote favorite. Quand Laplace eut publié sa Mécanique céleste, disait-il, l'empereur le fit venir. L'empereur était furieux. - Comment, s'écria-t-il en apercevant Laplace, vous faites tout le système du monde, vous donnez les lois de toute la création et dans tout votre livre vous ne parlez pas une seule fois de l'existence de Dieu ! - Sire, répondit Laplace, je n'avais pas besoin de cette hypothèse. »

Victor Hugo (1802-1885), *Choses vues*

L' OBJECTIF de cette première partie du mémoire est de développer une nouvelle identification du comportement monocristallin afin de mieux prendre en compte la « physique » du mouvement des dislocations, et notamment leurs interactions, dans les modèles.

Ce premier chapitre est le lieu d'un état de l'art en la matière et permet de poser les axes et méthodes de notre démarche.

Le comportement du monocristal, ainsi que sa description par les modèles, sont tout d'abord rappelé, avec un focus sur les interactions entre systèmes de glissement. Les dernières publications sur la quantification des interactions sont décryptées. Une courte présentation des lois monocristallines permet d'introduire et d'exposer les deux modèles utilisés dans ce travail, à savoir celui de Méric et Cailletaud, et celui de Tabourot-Teodosiu.

La déformation résulte, dans le cadre des faibles déformations et à température ambiante, du glissement des dislocations sous l'effet de la contrainte appliquée. Des dislocations mobiles sans cesse renouvelées par des mécanismes de multiplication, tels les sources de Franck-Read, sont éliminées en surface, ou annihilées par combinaison avec des dislocations de signe opposé. Cependant, cette élimination étant incomplète, un stockage important de lignes de dislocations a lieu pendant la déformation. Celles-ci sont bloquées par divers obstacles, notamment par interactions avec d'autres dislocations.

1.1 Etat de l'art

1.1.1 Les interactions entre dislocations

Les différents types d'interactions entre un système de glissement donné, dans un cristal CFC, et les dislocations d'autres systèmes, ont été répertoriés depuis 1960 [Hirth, 1960].

Il est généralement admis que seules les dislocations sécantes, ou « arbres de la forêt » constituent potentiellement des obstacles durcissants. Ainsi, pour des dislocations parfaites, et dans le cas de systèmes sécants, un système donné peut former trois types de jonction : la jonction de Hirth, la jonction glissile et la jonction de Lomer. Il existe deux configurations possibles conduisant à des jonctions de Lomer, deux autres à des jonctions de Hirth, mais quatre mènent à des jonctions glissiles.

Hors des systèmes sécants, trois types d'interactions peuvent intervenir. Il s'agit tout d'abord des interactions dipolaires, à savoir l'interaction d'un système avec lui-même, ou avec un système coplanaire. L'interaction d'auto-écrouissage est plus faible que celles donnant lieu à formation de jonctions. Puis viennent les interactions entre systèmes coplanaires, lesquels conduisent à des configurations glissiles. Enfin, se distingue l'interaction entre un système et son système dévié, appelée également interaction colinéaire. Les notations de Schmid et Boas [Schmid et Boas, 1935], utilisées pour repérer les systèmes de glissement sont rappelées au tableau 1.1.

	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
Plan	$\{\bar{1}11\}$			$\{111\}$			$\{\bar{1}\bar{1}1\}$			$\{1\bar{1}1\}$		
Vis	$\langle 0\bar{1}1 \rangle$	$\langle \bar{1}01 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 0\bar{1}1 \rangle$	$\langle \bar{1}01 \rangle$	$\langle \bar{1}10 \rangle$	$\langle 011 \rangle$	$\langle 101 \rangle$	$\langle \bar{1}10 \rangle$	$\langle 011 \rangle$	$\langle \bar{1}01 \rangle$	$\langle 110 \rangle$

TAB. 1.1 – Notation de Schmid et Boas [Schmid et Boas, 1935] permettant de repérer les systèmes de glissement. Pour chaque système, la lettre indique le plan de glissement tandis que le chiffre désigne le vecteur de Burgers.

Données expérimentales

Les propriétés plastiques des monocristaux de structure cubique à faces centrées sont expérimentalement bien documentées. Elles dépendent des propriétés élastiques des dislocations,

<div>Durcissement \ Auteur</div>	Basinski & Basinski	Franciosi
Très fort	Lomer Glissile Dévié	Lomer
Fort	Hirth	Glissile
Faible	Coplanaire	Hirth Coplanaire Dévié

TAB. 1.2 – Classement des interactions selon Basinski et Basinski [Basinski et Basinski, 1979], et Franciosi [Franciosi *et al.*, 1980]. Analyses conduites pour des matériaux à structures cristallographiques cubiques à faces centrées. Les travaux de Franciosi ici indiqués portent sur du cuivre. Basinski et Basinski effectuent une synthèse des données bibliographiques obtenues essentiellement sur du cuivre pur en glissement simple.

et, à basse et moyenne température, du glissement dévié. Par contre, il y a peu d’informations expérimentales quantitatives disponibles quant à la description des interactions entre systèmes de glissement. Seules des estimations indirectes et approximatives ont pu être obtenues au travers de l’évaluation de l’écrouissage latent sur des monocristaux [Franciosi *et al.*, 1980], [Wu *et al.*, 1991].

En effet, il s’agit de procéder à des essais de traction en glissement simple avec changement de trajet. Une pré-déformation en glissement simple est d’abord réalisée dans l’objectif de densifier un des systèmes de glissement et donc de créer un durcissement latent des systèmes qui lui sont sécants. Lors de la seconde étape, un nouvel axe de traction est choisi de manière à se trouver toujours en glissement simple, mais pour un des systèmes sécants du premier système sollicité.

En 1979, Basinski et Basinski [Basinski et Basinski, 1979] présentent une compilation de résultats. En 1980, Franciosi [Franciosi *et al.*, 1980] classe lui aussi les différents types d’interactions entre eux, mais de façon assez différentes (voir le tableau 1.2). Il est à noter toutefois que Basinski et Basinski avaient peu d’informations sur les interactions de Lomer, tandis que Franciosi a obtenu ses résultats sur le système dévié (interaction colinéaire) de façon très indirecte. A partir de cet ensemble de résultats expérimentaux, Bassani et Wu [Bassani et Wu, 1991], en 1991, établissent un nouveau classement par force croissante des interactions :

$$\text{Auto-écrouissage} < \text{Colinéaire} < \text{Hirth} < \text{Coplanaire} < \text{Glissile} < \text{Lomer}.$$

Apport de la dynamique des dislocations

Récemment, des simulations ont tenté, par le biais de la dynamique des dislocations, d’évaluer quantitativement ces interactions : tout d’abord Fivel en 1997 [Fivel, 1997], puis

Madec et Devincre en 2001 [Madec, 2001], [Madec *et al.*, 2003], et Devincre en 2005-2006 [Devincre *et al.*, 2005], [Devincre *et al.*, 2006].

L'apport majeur de ces études se situe au niveau du glissement dévié et des interactions qui en découlent. Il apparaît tout d'abord d'un point de vue qualitatif, que le glissement dévié influe fortement sur l'organisation de la microstructure. Ainsi, le résultat de simulation présenté à la figure B.2, issue de [Madec, 2001], montre bien qu'en l'absence de glissement dévié, la microstructure est nettement moins organisée. Il est à noter en particulier que les murs sont plus nombreux et plus fins avec du glissement dévié.

D'un point de vue plus quantitatif, Madec et Devincre [Madec, 2001], [Devincre *et al.*, 2006], ont montré que l'interaction dite colinéaire était bien plus forte que considérée jusqu'à présent. L'origine de ce durcissement est expliquée par le fait que de nombreuses annihilations entre les systèmes primaire et dévié interviennent. En conséquence, de nombreux petits segments sont produits dans le plan de glissement primaire, limités par des nœuds à l'intersection des plans primaire et dévié. Il existe alors deux sources de durcissement. D'une part les nœuds réduisent la mobilité des lignes de dislocations et favorisent l'ancrage des petits segments primaires entre deux nœuds. D'autre part, ces segments immobiles ou peu mobiles constituent des obstacles répulsifs forts pour les autres dislocations mobiles émises par la même source.

1.1.2 Prise en compte dans les modèles de comportement monocristallin

La matrice d'interaction permet de prendre en compte les interactions entre systèmes dans les lois de comportement monocristallin. Mandel [Mandel, 1965], en 1965, y dissociait les effets durcissant des systèmes de glissement sur eux-mêmes par les termes diagonaux qui reflètent l'auto-écrouissage, de l'écrouissage latent (effet sur les autres systèmes) traduit par les autres termes de la matrice. Dans les années 1980, Franciosi [Franciosi, 1978], [Franciosi *et al.*, 1980], [Franciosi, 1984], [Franciosi, 1985], propose une écriture dans laquelle les douze interactions des systèmes octaédriques (structures cristallographiques cubiques à faces centrées) sont prises en compte. Le nombre de coefficients est réduit à six pour des raisons de symétrie. En résumé, les notations utilisées à la figure 1.2 sont :

- h_0 auto-écrouissage,
- h_1 interaction coplanaire,
- h_2 formation de verrous de Hirth (*i.e.* interaction entre systèmes de vecteurs de Burgers orthogonaux),
- h_3 interaction colinéaire (*i.e.* interaction entre un système et son système dévié),
- h_4 formation de jonctions glissiles,
- h_5 formation de verrous de Lomer.

Dans le cadre des modèles dit quasi-physiques, c'est-à-dire admettant les densités de dislocations pour variables internes, la matrice d'interaction est une matrice de coefficients constants portant sur des densités évolutives de dislocations. Dans le contexte des modèles phénoménologiques, les interactions entre systèmes de glissement sont décrites par une matrice d'écrouissage qui relie les incréments de cisssion critique et de glissement. Dans le cadre

Absence de glissement dévié :



Présence de glissement dévié :

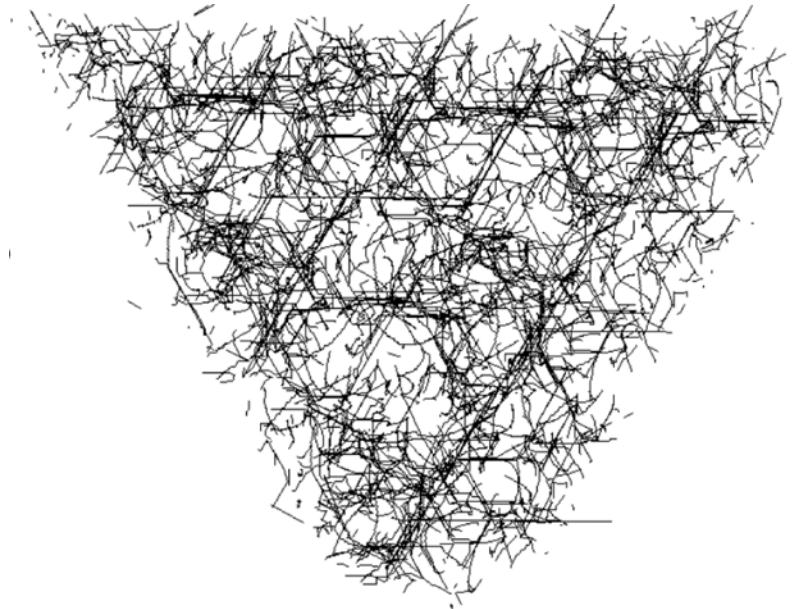


FIG. 1.1 – « Lames minces » extraites selon $[111]$ d'une simulation de traction selon l'axe $[100]$ sur monocristal. Les simulations réalisations avec une même densité de dislocations initiales. En l'absence de glissement dévié, l'organisation de la microstructure est peu perceptible ; avec glissement dévié, l'ébauche d'organisation est plus nette [Madec, 2001].

de ce travail, nous emploierons la même appellation « matrice d'interaction » pour ces deux matrices, bien qu'elles ne portent pas sur les mêmes grandeurs.

Franciosi a donc formalisé la matrice d'interaction, et tranché le débat de la forme de la loi d'écrouissage des modèles quasi-physiques, nous y reviendrons ultérieurement. Mais les proportions entre coefficients de cette matrice sont restées longtemps mal déterminées. Ils étaient souvent pris tous égaux à l'unité. En 1991, Méric et Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991], dans le cadre de leur modèle phénoménologique, ont proposé des coefficients légèrement différents pour du cuivre pur. Ces derniers étaient identifiés dans le cadre d'essais macroscopiques cycliques, selon la philosophie en vigueur à l'époque : « interaction de Lomer la plus forte ». En 1997, Tabourot [Tabourot *et al.*, 1997] utilise, pour son modèle quasi-physique, les coefficients de Franciosi.

Madec et Devincre en 2001 et 2003 [Madec, 2001], [Madec *et al.*, 2003], puis Devincre en 2006 [Devincre *et al.*, 2006], proposent deux jeux de coefficients assez proches, établis selon une approche en dynamique des dislocations et non plus cette fois identifiés. Les rapports entre coefficients qu'ils proposent sont novateurs puisque le rapport entre les coefficients décrivant les interactions colinéaires et celui des formations de verrous de Lomer est de l'ordre de 5, et de 15 entre interactions colinéaires et formations de verrous de Hirth. Ces jeux de coefficients sont présentés au tableau 1.3. Madec [Madec, 2001] fait état des incertitudes sur les résultats obtenus en indiquant qu'elles ont une origine statistique et sont incontournables dans un faible volume. Toutefois il estime qu'elles n'excèdent pas 20%.

Concernant le durcissement résultant des jonctions de Hirth, le résultat présenté est compatible avec les études antérieures [Basinski et Basinski, 1979], [Franciosi *et al.*, 1980].

Par contre, concernant la formation des deux autres types de jonctions, le résultat n'est pas celui attendu au regard des études de Franciosi [Franciosi *et al.*, 1980], [Franciosi, 1985], puisque le durcissement obtenu est plus fort avec des jonctions glissiles qu'avec des verrous de Lomer. Selon Basinski et Basinski [Basinski et Basinski, 1979], les incertitudes expérimentales ne permettent pas de distinguer une éventuelle différence entre ces deux coefficients. Il est également à noter que Devincre [Devincre *et al.*, 2006] fait part d'une incertitude, côté dynamique des dislocations, à cet endroit.

En ce qui concerne les interactions dipolaires, les valeurs obtenues sont plus faibles que celles associées aux jonctions. Si les résultats obtenus sont qualifiés de « raisonnables » par leurs auteurs, il est toutefois à noter que l'incertitude est plus grande pour ces deux coefficients.

La valeur obtenue pour les interactions colinéaires est 5 à 10 fois, suivant l'auteur [Madec, 2001], [Devincre *et al.*, 2006], plus forte que celles associées aux jonctions. Si ce résultat est très surprenant en regard des travaux de Franciosi [Franciosi *et al.*, 1980], [Franciosi, 1985], il est par contre « qualitativement » acceptable aux yeux de ceux de Basinski et Basinski [Basinski et Basinski, 1979] qui classent cette interaction parmi les plus fortes. Par ailleurs, cette valeur est cohérente avec les analyses issues de la dynamique des dislocations présentées ci-dessus (paragraphe 1.1.1). Madec [Madec, 2001] indique que l'incertitude sur la valeur exacte de ce coefficient est assez grande car elle augmente avec la variation de la densité de dislocations des systèmes, laquelle évolue nécessairement pour le système dévié sous l'effet

des mécanismes d'annihilation.

En résumé, les simulations de dynamique des dislocations menées par Madec et Devincré [Madec, 2001], [Devincre *et al.*, 2006] préconisent le classement suivant :

$$\text{coplanaire} < \text{auto-écrouissage} < \text{Hirth} < \text{Lomer} < \text{glissile} < \text{colinéaire} \\ (i.e. \quad h_1 < h_0 < h_2 < h_5 < h_4 < h_3).$$

Trois groupes se dégagent nettement : les interactions dipolaires, la formation de jonctions entre systèmes sécants, et l'interaction colinéaire.

Type d'interaction	Interactions colinéaires	Verrous de Hirth	Jonctions glissiles	Verrous de Lomer
[Madec <i>et al.</i> , 2003]	1.265 ± 0.125	0.0510 ± 0.0121	0.075 ± 0.014	0.084 ± 0.012
[Devincre <i>et al.</i> , 2006]	0.625 ± 0.044	0.0454 ± 0.003	0.137 ± 0.014	0.122 ± 0.012

TAB. 1.3 – Coefficients adimensionnels proposés respectivement par Madec et Devincré pour la matrice d'interaction des structures cubiques à faces centrées. Ces coefficients ont été obtenus à l'aide de simulations par dynamique des dislocations.

1.2 Orientation retenue

L'apport récent de la dynamique des dislocations ouvre des perspectives nouvelles en matière de simulation du comportement. La connaissance des mécanismes d'interactions entre dislocations a beaucoup évolué, et donc la description de l'écrouissage. Ces jeux de coefficients ont été testés [Devincre *et al.*, 2006] dans le cadre de simulations monocristallines. Mais qu'en est-il des polycristaux ? Sur d'autres trajets de chargements, notamment les chargements non-proportionnels ? Cette nouvelle description de l'écrouissage latent permet-elle de mieux décrire des chargements complexes tel le chargement orthogonal jusqu'à présent mal représenté ?

Enfin, ces jeux de paramètres ont été testés dans le cadre des modèles monocristallins de type quasi-physique. Si ceux-ci ont l'avantage de s'appuyer sur des grandeurs évaluables expérimentalement, leur développement n'est à ce jour pas suffisant pour aborder les chargements les plus complexes ... Ceux-là même que parviennent, d'avantage, à décrire les modèles phénoménologiques (cristallins). Il apparaît donc important de transposer aussi cette nouvelle description de l'écrouissage latent dans les modèles phénoménologiques et d'en étudier leurs réponses.

Nous nous proposons donc de (ré-)identifier le comportement au travers d'essais non-proportionnels, dûment choisis, en se focalisant sur la matrice d'interaction.

	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
A2	h_0	h_1	h_1	h_3	h_4	h_4	h_2	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4
A3	h_1	h_0	h_1	h_4	h_2	h_5	h_4	h_3	h_4	h_5	h_2	h_4
A6	h_1	h_1	h_0	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_4	h_3
B2	h_3	h_4	h_4	h_0	h_1	h_1	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_5
B4	h_4	h_2	h_5	h_1	h_0	h_1	h_5	h_2	h_4	h_4	h_3	h_4
B5	h_4	h_5	h_2	h_1	h_1	h_0	h_4	h_4	h_3	h_5	h_4	h_2
C1	h_2	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4	h_0	h_1	h_1	h_3	h_4	h_4
C3	h_4	h_3	h_4	h_5	h_2	h_4	h_1	h_0	h_1	h_4	h_2	h_5
C5	h_5	h_4	h_2	h_4	h_4	h_3	h_1	h_1	h_0	h_4	h_5	h_2
D1	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_5	h_3	h_4	h_4	h_0	h_1	h_1
D4	h_5	h_2	h_4	h_4	h_3	h_4	h_4	h_2	h_5	h_1	h_0	h_1
D6	h_4	h_4	h_3	h_5	h_4	h_2	h_4	h_5	h_2	h_1	h_1	h_0

FIG. 1.2 – Matrice d'interaction des systèmes de glissement pour une structure cubique face centrée, issue de [Franciosi, 1984]. La famille de systèmes de glissement est $\{110\} \langle 111 \rangle$.

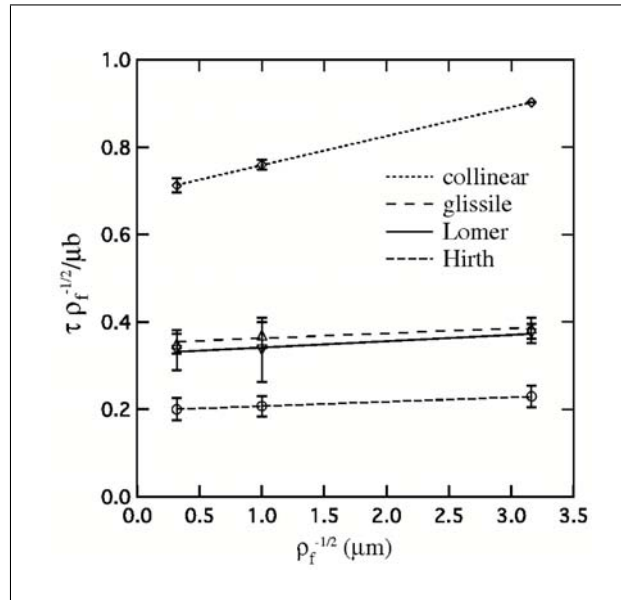


FIG. 1.3 – Valeurs des coefficients d'interaction écrit sous la forme provenant de l'équation de Taylor ($\tau = \mu b \sqrt{\rho}$), en fonction de la densité des arbres de la forêt pour les quatre types d'interactions entre systèmes de glissement [Devincre *et al.*, 2006].

1.3 Lois monocristallines étudiées et identifications antérieures

Les coefficients proposés par Devincere [Devincere *et al.*, 2006] ont été obtenus dans le cadre d'une loi de type quasi-physique. Il apparaît judicieux d'utiliser le même type de loi pour la première identification. Le modèle de Tabourot-Teodosiu¹ [Tabourot *et al.*, 1997] est ainsi retenu.

Par ailleurs, l'identification est également réalisée sur modèle phénoménologique. La loi Méric-Cailletaud est une loi phénoménologique cristalline en ce sens qu'elle prend en compte l'activité des systèmes de glissement via sa matrice d'interaction, matrice sur laquelle portera évidemment toute notre attention. Cette loi comporte un écrouissage cinématique qui n'interviendra pas dans cette partie par homogénéité avec la loi de Tabourot-Teodosiu.

1.3.1 Définitions généralement communes aux modèles de plasticité cristalline.

Ce travail se situe dans le cadre des faibles déformations. L'hypothèse des transformations infinitésimales, selon laquelle les rotations de réseaux sont négligeables, est ici utilisée. Ainsi :

$$\underline{\varepsilon} = \underline{\varepsilon}^e + \underline{\varepsilon}^p. \quad (1.1)$$

Les modèles de plasticité cristalline font généralement l'hypothèse que le glissement est le mode de déformation prédominant. Les modélisations décrivent la déformation moyenne résultante sur le volume du grain en écrivant le tenseur taux de déformation $\dot{\underline{\varepsilon}}^p$ à partir de la somme des vitesses de glissement $\dot{\gamma}^s$ sur chacun des systèmes :

$$\dot{\underline{\varepsilon}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\mathbf{m}}^s. \quad (1.2)$$

Cette relation introduit le tenseur d'orientation $\underline{\mathbf{m}}^s$ qui exprime les caractéristiques géométriques du système de glissement s :

$$\underline{\mathbf{m}}^s = \frac{1}{2}(\underline{\mathbf{m}}^s \otimes \underline{\mathbf{n}}^s + \underline{\mathbf{n}}^s \otimes \underline{\mathbf{m}}^s) \quad (1.3)$$

où $\underline{\mathbf{n}}^s$ et $\underline{\mathbf{m}}^s$ sont respectivement la normale unitaire au plan de glissement et la direction unitaire de glissement dans le plan.

Enfin, bien que ceci soit une approximation pour du cuivre, il est apparu plus simple de considérer l'élasticité comme isotrope, afin que l'unique source d'hétérogénéité provienne du comportement viscoplastique. A noter également que l'identification (détaillée au chapitre suivant) a requis l'usage du modèle d'homogénéisation de Berveiller-Zaoui [Berveiller et Zaoui, 1979], non valide en élasticité anisotrope.

¹Nous faisons ici référence au modèle proposé par Tabourot, dans le cadre de sa thèse [Tabourot, 1992], et dont la description a été complétée par la suite : [Tabourot, 2001], [Tabourot *et al.*, 1997], [Déprés *et al.*, 2008]. La formulation ici utilisée est celle de 1997, co-écrite avec M.Fivel et E.Rauch.

1.3.2 Approche quasi-physique : le modèle de Tabourot-Teodosiu

Cette loi de comportement [Tabourot *et al.*, 1997] admet pour variables internes une densité de dislocations par systèmes de glissement.

La loi d'écoulement adoptée est de type puissance :

$$|\dot{\gamma}^s| = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau^s|}{\tau_\mu^s} \right)^{\left(\frac{1}{m}\right)} \quad (1.4)$$

où $\dot{\gamma}^s$ est la vitesse d'écoulement sur le système s , $\dot{\gamma}_0$ une valeur de référence de la vitesse d'écoulement, τ^s la cission résolue sur le système s , τ_μ^s la cission critique sur le système s , et m un exposant caractérisant la sensibilité à la vitesse.

La loi d'écrouissage retenue par Tabourot est de forme quadratique, comme prescrit par Franciosi dans les années 1980 [Franciosi *et al.*, 1980]. Pour la justification de la forme de cette loi d'écrouissage des modèles quasi-physiques, et une discussion relative aux autres formes envisagées antérieurement, il convient de se reporter aux travaux [Franciosi *et al.*, 1980], [Franciosi, 1984], [Franciosi, 1985].

La cission critique pour chaque système de glissement est déterminée, par généralisation du modèle de la forêt, en fonction des densités de tous les systèmes de glissement et des coefficients de la matrice d'interaction. Pour un système s interagissant avec un système p de densité ρ^p (y compris lorsque $s = p$), la cission critique est définie par :

$$\tau_c^{sp} = \alpha \mu b \sqrt{\sum_p d^{sp} \rho^p}, \quad (1.5)$$

où μ le module élastique de cisaillement, b la norme du vecteur de Burgers, et α est un coefficient adimensionnel inférieur à l'unité, souvent pris égal à 0,3 pour du cuivre. Il traduit la force moyenne des obstacles rencontrés par les lignes de dislocations. Madec [Madec, 2001] a étudié, à la fois par dynamique des dislocations et par simulation à l'aide d'un modèle monocristallin quasi-physique, la valeur qu'il convient de lui attribuer. Il obtient une valeur moyenne de 0.38 ± 0.04 , en bon accord avec les données expérimentales de Heinrich et al. [Heinrich *et al.*, 1992] sur monocristal de cuivre et Hansen et Huang [Hansen et Huang, 1998] sur polycristal d'aluminium.

La matrice d^{sp} décrit l'effet de la densité de dislocations de chaque système p sur la cission critique. Afin de limiter le nombre de coefficients à identifier, et compte-tenu de la présence d'une seconde matrice d'interaction dans la loi d'évolution des densités de dislocations, Tabourot, Fivel et Rauch font le choix d'une matrice dont tous les coefficients sont égaux à 1 dans [Tabourot *et al.*, 1997]. Lors d'une identification ultérieure [Tabourot *et al.*, 1999], [Tabourot, 2001], ils préfèrent la réduire à :

$$d^{sp} = \alpha^2, \quad (1.6)$$

s'appuyant sur une analyse phénoménologique de Bell en 1964 [Bell, 1964] portant sur les stades II et III de la déformation.

Dans notre travail, il a été choisi de conserver ici la forme complète de la matrice de Franciosi [Franciosi *et al.*, 1980], à l'instar des travaux de dynamique des dislocations [Devincere *et al.*, 2006]. En conséquence, nous écrirons la loi d'écrouissage sous la forme :

$$\tau_c^{sp} = \alpha \mu b \sqrt{\sum_p a^{sp} \rho^p}, \quad (1.7)$$

avec a^{sp} la matrice de Franciosi.

La loi d'évolution de la densité totale de dislocations ρ^s sur le système s considéré se décompose classiquement en un terme de production et un terme d'annihilation. Plusieurs formulations ont été proposées en matière de loi d'évolution de la densité totale de dislocations, la forme généralement commune en est :

$$\dot{\rho}^s = \left(\frac{1}{b\Lambda^s} - k\rho^s \right) |\dot{\gamma}^s|, \quad (1.8)$$

où b désigne la norme du vecteur de Burgers, Λ^s le libre parcours moyens des dislocations mobiles, et k est une constante.

L'intérêt du modèle de Tabourot repose sur l'hypothèse faite quant à la définition du libre parcours moyens des dislocations mobiles, celui-ci étant pris homogène à l'inverse d'une racine carrée de dislocations forêt :

$$\Lambda^s = \frac{\sqrt{\sum_p a^{sp} \rho^p}}{K}. \quad (1.9)$$

K est le facteur de proportionnalité entre le libre parcours moyen de la distance entre dislocations forêts (qui percent le plan de glissement d'un système donné). La matrice a^{sp} intègre la géométrie de l'interaction entre les dislocations considérées s et les dislocations forêts p . Il s'agit de la matrice d'interaction définie par Franciosi [Franciosi *et al.*, 1980]. En reportant 1.9 dans 1.8, et en considérant que la densité de dislocations immobiles est approximativement égale à la densité totale sur le système, il vient la loi d'évolution de Tabourot :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left(\frac{\sqrt{a^{sp} \rho^p}}{K} - 2y_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s|, \quad (1.10)$$

avec $y_c = R\beta$, où R est le rayon de capture et β un facteur correctif (seule une partie de la dislocation peut s'annihiler).

Les paramètres matériau, issus de [Tabourot *et al.*, 1997] et de [Tabourot, 2001], sont reportés en table 1.4 pour le cuivre.

	μ (GPa)	b (m)	m	$\dot{\gamma}_0$ (s ⁻¹)	α	ρ_0 (m ⁻²)	y_c	K
a)	42	2,56x10 ⁻¹⁰	0,05	10 ⁻¹⁰	0,3	10 ¹⁰	3,36b	38
b)	42	2,56x10 ⁻¹⁰	0,05	7,6.10 ⁻¹⁶ , 3,4.10 ⁻⁶	0,3	10 ⁸	3,25b	36

matrice d'interaction						
	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
a)	0.2	0.3	0.3	0.3	0.4	1.
b)	0.003	0.4	0.4	0.4	0.75	1.

TAB. 1.4 – Paramètres identifiés par Tabourot sur monocristaux de cuivre : a) [Tabourot *et al.*, 1997], b) [Tabourot, 2001].

1.3.3 Approche micromécanique phénoménologique : le modèle de Méric et Cailletaud.

Les modèles de type micromécanique phénoménologique se situent entre l'approche microscopique et l'approche macroscopique. Le cadre choisi prend en compte la microstructure du monocristal en introduisant la notion de mécanisme élémentaire, responsable de la déformation inélastique, mais celui-ci reste phénoménologique dans l'écriture des lois gouvernant l'écrouissage du monocristal. Méric et Cailletaud ont proposé une formulation phénoménologique inscrite dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles (voir [Germain, 1973]) : [Cailletaud, 1987], [Cailletaud, 1988], [Méric, 1991], [Méric *et al.*, 1991], [Cailletaud, 1992].

La loi d'écoulement est de type viscoplastique à seuil, avec écrouissage additif :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{K} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad (1.11)$$

où K et n caractérisent la viscosité. Deux types d'écrouissage sont introduits : r^s représente l'écrouissage isotrope, et x^s l'écrouissage cinématique.

L'évolution non linéaire de l'écrouissage isotrope décrit l'augmentation de la cission critique sur un système avec le glissement cumulé sur chacun des systèmes. Son expression introduit une matrice d'interaction h^{sr} , ou plus précisément d'écrouissage. Celle-ci adopte néanmoins la forme décrite par Franciosi (figure 1.2).

$$r^s = R_0 + Q \sum_r h^{sr} \{1 - \exp(-Bv^r)\}, \quad \text{avec} \quad v^r = |\dot{\gamma}^r|. \quad (1.12)$$

La forme exponentielle de la loi d'écrouissage 1.12 permet une saturation de la cission critique. Le coefficient B représente la sensibilité du matériau vis-à-vis de cette saturation. Le terme $Q \sum_r h^{sr}$ décrit l'augmentation maximale de la cission critique sur le système s due à l'effet durcissant de la déformation sur les systèmes r . Dans le cas de chargements complexes (ou aux fortes déformations), cette expression de l'écrouissage 1.12 permet une meilleure description

viscosité		écr. isotrope					écr. cinématique	
K (MPa.s ^{1/n})	n	R_0 (MPa)	Q_1 (MPa)	B_1	Q_2 (MPa)	B_2	c (MPa)	d
5	10	0.817	3.623	1.618	0.682	2257	3402	3596

matrice d'écrouissage					
h_0	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
1	4.40	4.75	4.75	4.75	5.00

TAB. 1.5 – Paramètres identifiés par Méric [Méric *et al.*, 1994] sur monocristaux de cuivre sous chargement cyclique.

du comportement du matériau grâce à la prise en compte de la saturation.

Méric et Cailletaud, [Cailletaud, 1988], [Méric et Cailletaud, 1991], ont ajouté aux modélisations micromécaniques antérieures une forme d'écrouissage cinématique à l'échelle des systèmes de glissement, à l'instar de la représentation phénoménologique de l'écrouissage des matériaux métalliques faite par Lemaitre et Chaboche [Lemaitre et Chaboche, 1993]. Cette description repose sur l'idée d'introduire la notion de cission effective ($\tau^s - x^s$) sur un système afin de rendre compte des interactions à longue distance entre dislocations :

$$x^s = c\alpha^s \quad \text{et} \quad \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\dot{v}^s\alpha^s, \quad (1.13)$$

c et d sont les paramètres permettant d'ajuster l'effet de la formulation. Dans le cadre des chargements cycliques, ce modèle s'avère plus particulièrement performant pour la description de l'effet Bauschinger, caractérisé par l'abaissement du seuil de plasticité en chargement inversé.

En 1991, Méric [Méric, 1991] avait effectué une identification sur monocristal de cuivre sous chargement cyclique en faible déformation (déformation comprise entre -0,5% et +0,5%). Les coefficients obtenus alors sont présentés dans le tableau 1.5. Les paramètres de viscosité avaient été volontairement laissés assez bas faute de données expérimentales. L'écrouissage isotrope était décrit par la somme de deux termes du fait d'un premier cycle sensiblement différent des suivants en matière de saturation de l'écrouissage. Les coefficients de la matrice d'interaction n'avaient pu être déterminés avec précision.

En 2005, Musienko [Musienko, 2005] a de nouveau identifié un jeu de paramètres se rapportant au cuivre, en s'appuyant cette fois-ci sur des essais réalisés sur polycristaux. Le jeu de paramètres obtenu est indiqué dans le tableau 1.6.

1.3.4 Parallèle formel entre les lois de Tabourot et de Méric-Cailletaud

Un court parallèle entre les deux modèles est ici initié. Son objectif est essentiellement de permettre la comparaison des résultats d'identification présentés au chapitre suivant.

viscosité		écr. isotrope			écr. cinématique	
K (MPa.s ^{1/n})	n	R_0 (MPa)	Q (MPa)	B	c (MPa)	d
5	10	1.8	6	15	4500	600

matrice d'écrouissage					
h_0	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
1.00	4.40	4.75	4.75	4.75	5.00

TAB. 1.6 – Dans sa simulation de traction sur cuivre en grande déformation, Musienko [Musienko, 2005] a conservé les paramètres d'élasticité et de viscosité de Méric [Méric *et al.*, 1994], et adapté ceux des écrouissages isotropes et cinématiques.

La loi d'évolution de la densité de dislocations du modèle de Tabourot-Teodosiu s'écrit :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left\{ \frac{\sqrt{a^{rs}\rho^s}}{K} - 2y_c \rho^s \right\} |\dot{\gamma}^s|. \quad (1.14)$$

Posons le changement de variable : $q^s = b^2 \rho^s$. Il vient alors :

$$\dot{q}^s = \left\{ \frac{\sqrt{a^{rs}b^2\rho^s}}{K} - \frac{2y_c}{b} (b^2 \rho^s) \right\} |\dot{\gamma}^s|. \quad (1.15)$$

Dans le cadre d'une analyse analytique des matériaux de structure CFC, il est souvent admis que : $\sqrt{a^{rs}b^2\rho^s} = \xi \sqrt{q^s}$, où ξ est une constante. En conséquence, il vient :

$$\dot{q}^s = \left\{ \frac{\xi}{K} \sqrt{q^s} - \frac{2y_c}{b} q^s \right\} |\dot{\gamma}^s|. \quad (1.16)$$

En intégrant l'équation 1.16 et en faisant le changement de variable inverse, il vient :

$$\rho^s = \left(\frac{\xi}{2Ky_c} \right)^2 \{ 1 - \exp(-\frac{y_c}{b} |\dot{\gamma}^s|) \}^2. \quad (1.17)$$

En remplaçant 1.17 dans la loi d'écrouissage, nous obtenons :

$$\tau_c^s = \alpha \mu b \left(\frac{\xi}{2Ky_c} \right) \sqrt{\sum_r a^{rs} \{ 1 - \exp(-\frac{y_c}{b} |\dot{\gamma}^s|) \}^2} \quad (1.18)$$

Pour mémoire, la loi d'écrouissage du modèle de Méric et Cailletaud s'écrit :

$$\tau_c^s = \tau_0 + Q \sum_r h^{rs} \{ 1 - \exp(-Bv^s) \}, \quad (1.19)$$

avec $v^s = |\dot{\gamma}^s|$.

Cette confrontation, effectuée en sollicitation monotone, laisse à penser que les valeurs numériques des coefficients de la matrice d'écrouissage h^{rs} présente dans le modèle Méric-Cailletaud doivent être proportionnelles au carré des coefficients de la matrice d'interaction a^{rs} du modèle de Tabourot-Teodosiu.

De même, le coefficient B décrivant la saturation de l'écrouissage dans la loi Méric-Cailletaud aurait une valeur proche du carré du rapport $\frac{y_c}{b}$ issu de la loi de Tabourot-Teodosiu.

En conclusion ...

- Les récents résultats de dynamique des dislocations proposent une nouvelle vision des interactions entre systèmes de glissement selon laquelle les interactions colinéaires auraient un poids majeur : le glissement dévié et ses interactions engendreraient une microstructure plus organisée avec des murs de dislocations plus nombreux et plus fins.
- Dans le cadre des lois quasi-physiques du comportement monocristallin, Madec et Devincere proposent de distinguer trois groupes d'interactions de force croissante : les interactions dipolaires, les jonctions entre systèmes sécants, et l'interaction entre systèmes primaire et dévié.
- Ils classent les coefficients de la matrice d'interaction dans l'ordre suivant :

$$\text{coplanaire} < \text{auto-écrouissage} < \text{Hirth} < \text{Lomer} < \text{glissile} < \text{colinéaire}$$

$$(\text{i.e. } h_1 < h_0 < h_2 < h_5 < h_4 < h_3).$$

- Selon Madec, négliger les interactions dipolaires a peu d'impact, mais négliger les interactions colinéaires ou les formations de jonction conduit à sous-estimer la contrainte de 20 à 30% (suivant le système considéré).
 - Madec propose la valeur de $0,38 \pm 0,04$ pour le coefficient α des modèles monocristallins quasi-physiques.
 - Un parallèle analytique entre les modèles quasi-physiques de Tabourot-Teodosiu et phénoménologique de Méric-Cailletaud indique qu'il convient de comparer (relation de proportionnalité) les valeurs des coefficients de la matrice d'écrouissage de la loi phénoménologique aux carrés des coefficients de la matrice d'interaction de la loi quasi-physique. De même, une valeur proche du carré du rapport $\frac{\gamma_c}{b}$, issu de la loi Tabourot-Teodosiu, est attendu pour le coefficient B de saturation de l'écrouissage de la loi Méric-Cailletaud.
-

Chapitre 2

Interactions entre systèmes de glissement

"...when you have eliminated the impossible, whatever remains, however improbable, must be the truth."

Sir Arthur Conan Doyle (1859-1930)

CE CHAPITRE rapporte l'étude menée sur la description quantitative de l'écrouissage latent dans les modèles monocristallins.

Des essais menés sous compositions de chargements monotones nous permettent de nous appuyer sur une référence expérimentale.

Une méthode d'identification¹ par calculs éléments finis est développée sur volume élémentaire dépourvu de surface.

Les résultats obtenus sont confrontés² à l'aide de différents modèles d'homogénéisation. Deux lois monocristallines sont étudiées : l'une phénoménologique cristalline³ [Méric et Cailletaud, 1991], l'autre quasi-physique [Tabourot et al., 1997]⁴.

¹La procédure d'identification ici proposée a été présentée au 16th *International Workshop of Computational Mechanics of Materials*, Lublin (Pologne), juillet 2006 [Gérard et al., 2006].

²Les résultats des deux identifications ont donné lieu à une communication au 17th *International Workshop of Computational Mechanics of Materials*, Paris, août 2007 [Gérard et al., 2007a].

³L'identification sur modèle phénoménologique cristallin a fait l'objet d'un premier article soumis à la revue *Computational Mechanics of Materials* [Gérard et al., 2008b].

⁴L'ensemble des résultats des deux identifications et leur analyse comparée est repris dans un article soumis [Gérard et al., 2008].

2.1 Mise en œuvre expérimentale

2.1.1 Caractérisation de la texture

Le matériau utilisé est un cuivre pur (*OFHC*) laminé à chaud, laminé à froid et recristallisé. La texture a été mesurée par diffraction aux rayons X. Le diffractomètre utilisé est un goniomètre quatre cercles situé à la sortie d'un faisceau monochromatique de cobalt. Les mesures sont effectuées par pas de 5° en azimuth et 5° en déclinaison. Les figures de pôles sont ensuite corrigées du bruit de fond, défocalisées, et normalisées. Les mesures sont faites selon les familles de plans d'intensité maximale : à savoir, dans le cas présent $\{111\}$, $\{200\}$, $\{220\}$. Les fonctions de distribution sont ensuite calculées avec la méthode harmonique. Pour plus de détails se reporter à l'annexe C consacrée aux mesures de texture par diffraction aux rayons X.

Les figures de pôles obtenues sont présentées à la figure 2.1, la fonction de distribution des orientations est disponible à l'annexe C. Il y apparaît une texture cube relativement marquée, résultat assez classique pour un cuivre recuit.

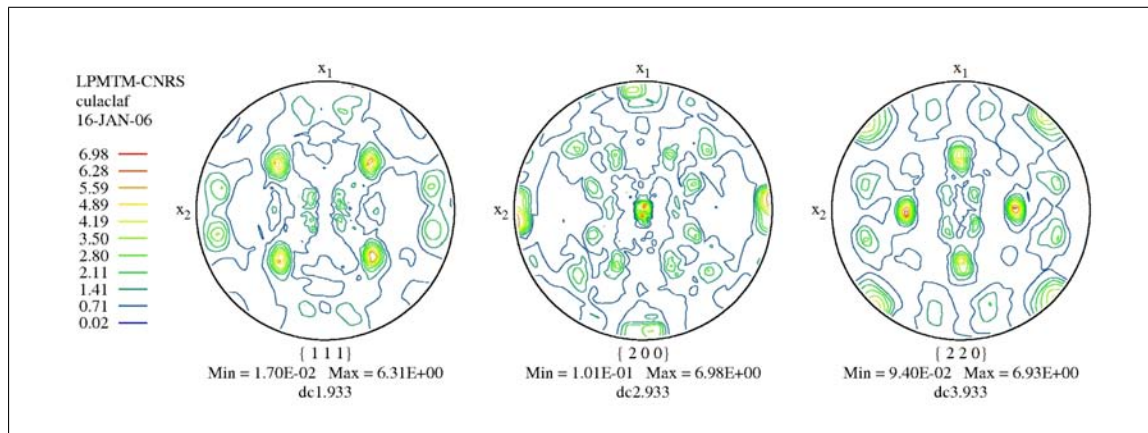


FIG. 2.1 – Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud, puis à froid, et recristallisé.

2.1.2 Réalisation des essais

Trajets de chargement

Comme indiqué au chapitre 1, les trajets de chargements ont été choisis en fonction de leur non-proportionnalité. Quatre trajets de chargement sont étudiés : deux tractions et deux compositions de cisaillement et traction. La traction simple, dans l'axe de laminage du matériau, est une référence. Celle orientée à 45° de la direction de laminage nous permet d'estimer partiellement l'impact de la texture. Les deux autres trajets sont non-proportionnels.

Le paramètre θ , initialement proposé par [Schmitt *et al.*, 1985], permet de caractériser les changements dans un trajet de chargement :

$$\theta = \frac{\dot{\tilde{\epsilon}}_1 : \dot{\tilde{\epsilon}}_2}{|\dot{\tilde{\epsilon}}_1| |\dot{\tilde{\epsilon}}_2|} \quad (2.1)$$

avec $\dot{\tilde{\epsilon}}_1$ et $\dot{\tilde{\epsilon}}_2$ les tenseurs des vitesses de déformation respectivement des étapes 1 et 2 du chargement, et $|\dot{\tilde{\epsilon}}_i| = \sqrt{\dot{\tilde{\epsilon}}_i : \dot{\tilde{\epsilon}}_i}$.

Trois valeurs de θ reflètent des chargements particuliers :

- $\theta = 1$ correspond à un chargement (quasi-)monotone,
- $\theta = -1$ se rapporte au (quasi-)Bauschinger,
- $\theta = 0$ désigne un chargement orthogonal.

Comme le montre le calcul de θ , la composition d'un cisaillement suivi d'une traction sans rotation du repère est un chargement orthogonal ($\theta = 0$), c'est-à-dire le plus non-proportionnel qui soit [Benallal et Marquis, 1987], [Portier, 1999]. Il a été choisi ici pour cette caractéristique qui se traduit par un sur-écrouissage maximal, et une activation des systèmes de glissement propre. Enfin, le quatrième trajet est retenu pour son caractère intermédiaire. Il s'agit d'un cisaillement dans les axes de laminage, suivi d'une traction à 45° de la direction de laminage. Ce chargement, comme le montre le schéma 2.2, est équivalent à un chargement biaxié de traction-compression simultanées suivi d'une traction dans les mêmes axes que la première étape. Par voie de conséquence, les systèmes de glissement sont très semblables, seul l'effet d'histoire est présumé intervenir.

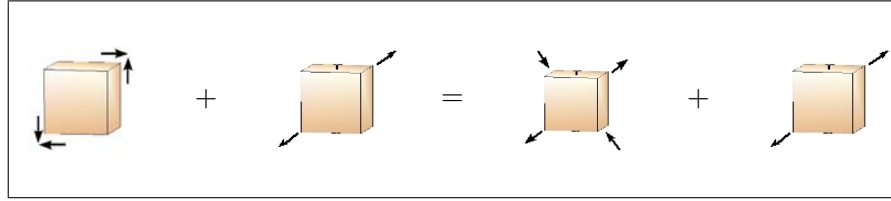


FIG. 2.2 – Schéma d'équivalence du chargement composé d'un pré-cisaillement suivi d'une traction après rotation de 45°.

Dispositif

La direction de cisaillement (axe 1 sur la figure 2.3) est parallèle à la direction de laminage de la tôle. Le dispositif de pré-déformation (voir figure 2.3 pour les cotations) a déjà été décrit dans [Genevois, 1992], [Bacroix *et al.*, 1994]. Le bâti est constitué d'un piston et de deux « enveloppes ». La fixation de l'éprouvette est assurée au moyen de 12 vis et boulons de type M20, et de mors placés dans les enveloppes et le piston. L'éprouvette de pré-déformation en cisaillement simple a une dimension hors-tout de 230 x 200 mm², et comporte deux zones utiles cisailées de 40 x 200 mm² chacune. Le flambement est évité, malgré la géométrie favorable (largeur de zone utile de 40 mm pour une épaisseur de 0,5 mm), en guidant les zones utiles. Si le matériau n'est pas suffisamment guidé (clinquants trop fins), la tôle se voile. Si au contraire les clinquants sont trop épais, le cisaillement n'est pas homogène. Le choix de l'épaisseur des

clinquants est conditionné par la dureté du matériau. A titre indicatif, le tableau 2.1 donne les caractéristiques pour deux matériaux. Afin de minimiser le frottement, les deux faces de chaque zone utile sont revêtues d'un film lubrifiant. Le couple de serrage est lui aussi fonction du matériau : s'il est trop important la tôle se déchire dans les mors.

Matériaux	Couple de serrage	Epaisseur des clinquants
Aciers durs	180 à 190 <i>N.m</i>	0,22 à 0,37 <i>mm</i>
Aluminium	50 à 70 <i>N.m</i>	0,5 <i>mm</i>

TAB. 2.1 – Paramètres d'utilisation des clinquants lors des essais de pré-cisaillement.

Pendant l'essai, le chargement est obtenu par pilotage du déplacement de traverse. *A posteriori*, le déplacement effectivement appliqué est mesuré par corrélation d'images. Pour ce faire, une grille d'un pas de 2 *mm* est au préalable sérigraphiée à la surface de l'échantillon. La déformation macroscopique en cisaillement est $\epsilon_{12} = 1,4\%$.

De petites éprouvettes de traction sont ensuite prélevées dans les zones cisailées de façon homogène, selon deux orientations différentes, à respectivement 0° et 45° de la direction de laminage (*i.e.* direction de pré-cisaillement). Tous les usinages ont été effectués par électro-érosion au fil afin de ne pas induire d'état de contrainte parasite.

La traction est effectuée sur la machine de traction / compression *in situ* du LMS. D'une part la géométrie de l'éprouvette (0,5 *mm* d'épaisseur, et une zone utile de 20 *mm* x 6 *mm*) ne permet pas l'utilisation d'une machine de traction classique ; d'autre part ces essais ont aussi donnés lieu à des mesures de champs qui seront présentées au chapitre 3. Cette machine peut fonctionner en traction ou compression et a une capacité de 5 kN. Il existe également une possibilité, non exploitée ici, de chauffage des éprouvettes par contact pour réaliser des essais en température. Les essais sont réalisés à déplacement imposé piloté grâce à un extensomètre à couteaux. Ce dernier a une base de mesure de 14 *mm*. Il est placé dans la zone utile. La vitesse de chargement est de 2 *mm.s*⁻¹.

Courbes d'écrouissage obtenues

Les courbes d'écrouissage obtenues pour la partie traction des chargements sont présentées à la figure 2.5. L'effet de la texture est négligeable (ou plus précisément situé dans l'erreur de mesure) entre les deux tractions simples (dont l'axe de sollicitation est respectivement orienté à 0° et 45° de la direction de laminage du matériau).

Le sur-écrouissage observé lors de la traction précédée d'un cisaillement à 45° est d'environ 11 *MPa*. Rappelons que ce sur-écrouissage est quasi-exclusivement dû à un effet d'histoire. En effet, un cisaillement à 45° est équivalent à une traction à 0° couplée à une compression à 90° (voir le schéma 2.2).

Enfin, le sur-écrouissage faisant suite au pré-cisaillement à 0° est d'environ 34 *MPa*. Il s'agit

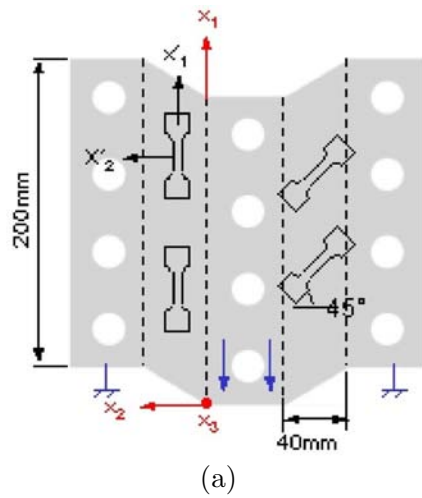


FIG. 2.3 – (a) Géométrie de l'éprouvette utilisée pour le pré-cisaillement, avec schéma de découpe des petites éprouvettes de traction. (b) Photo des mors utilisés pour guider les zones utiles de l'éprouvette lors du cisaillement, et ainsi éviter le flambement.

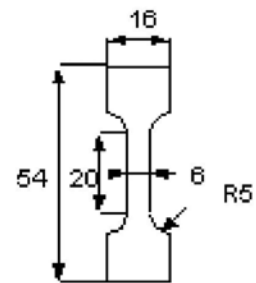
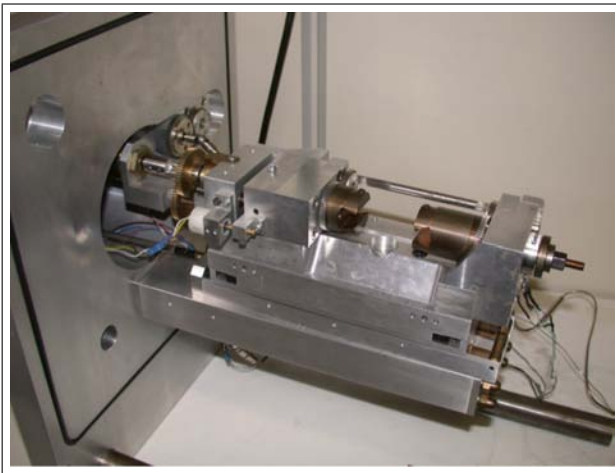


FIG. 2.4 – (a) Photo de la machine de traction *in situ* du LMS. (b) Géométrie de l'éprouvette de traction prélevée dans une tôle de cuivre OFHC de 0,5 mm d'épaisseur.

d'un chargement orthogonal, c'est-à-dire un chargement de non-proportionnalité maximale avec ce dispositif.

L'incertitude d'évaluation de la contrainte, qui est obtenue au moyen du capteur de force de la machine de traction, est de 5 %.

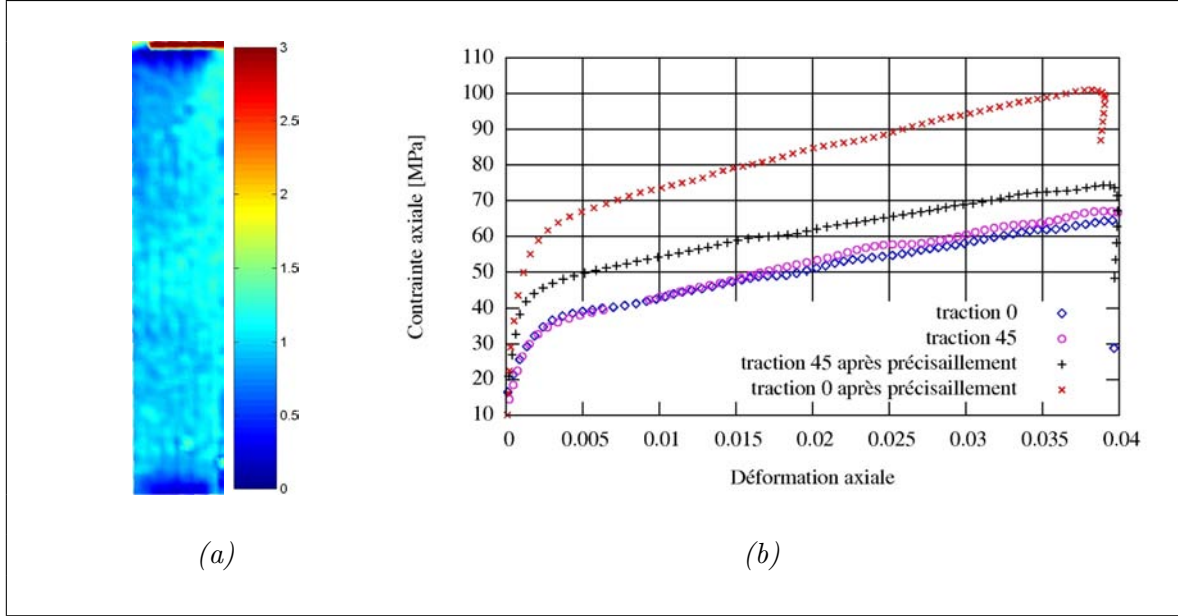


FIG. 2.5 – (a) Champ de déformation mesuré par corrélation d'images à l'issue du pré-cisaillage, à l'aide d'une grille d'un pas de 2 mm sérigraphiée à la surface de l'éprouvette. Il permet de prélever les éprouvettes de traction dans une zone de pré-déformation homogène. (b) Courbes d'écrouissage des différentes tractions effectuées : avec ou sans pré-cisaillage, à 0° ou 45° de la direction de laminage du matériau. Le déplacement est mesuré avec un extensomètre à couteaux de base de mesure 14 mm, et la force grâce à la cellule de la machine. Les tractions ont été réalisées sur la machine de traction *in situ* du LMS.

2.2 Méthode d'identification proposée

2.2.1 Définition générale de la méthode

L'objectif de cette partie est d'identifier le comportement monocristallin au moyen de simulations polycristallines. En conséquence, il nous est apparu important de mettre en place une procédure d'identification s'affranchissant au mieux des artefacts liés à la transition d'échelles. Les modèles en champs moyens présentent l'énorme avantage de la rapidité de mise en œuvre (dès lors que le code est disponible). Pour autant il nous fallait choisir un modèle⁵ :

- dont la prédiction ne sous-estime ni surestime le comportement, ce qui éliminait les modèles de Taylor [Taylor, 1938], Sachs [Sachs, 1928], Kröner [Kröner, 1961], ... ;

⁵Les modèles en champs moyens ne sont pas ici détaillés car étudiés plus largement en troisième partie.

- dont la formulation tient compte de l'élasticité;
- permettant d'aborder les chargements non-proportionnels, ce qui supprimait le modèle de Berveiller-Zaoui [Berveiller et Zaoui, 1979].

Les modèles à champs moyens envisageables étaient donc principalement la règle en β ([Cailletaud, 1987], [Pilvin, 1990], [Cailletaud et Pilvin, 1994], [Cailletaud et Saï, 2008]), ou les formulations par linéarisation affine en formulation élastoviscoplastique ([Masson, 1998], [Masson et Zaoui, 1999]). Deux formulations sont actuellement disponibles, mais aucune des deux n'a finalement été retenue. En effet, celle proposée par Masson [Masson, 1998] est assez lourde puisqu'elle nécessite un passage par l'espace complexe \mathbb{C} , et le recours aux transformées de Laplace-Carson. Brenner [Brenner, 2001] a écrit une version simplifiée (restant dans l'espace réel \mathbb{R}), mais limitée aux seuls chargements proportionnels. En conséquence, le modèle de la règle en β a été privilégié pour la procédure d'identification.

Les calculs par éléments finis permettaient de répondre à ces critères, tout en s'affranchissant de l'analyse de la transition d'échelles, sous réserve de choisir les bonnes conditions aux limites, la microstructure et le maillage adéquat, et d'avoir un nombre de grains suffisant pour être représentatif. En revanche, l'identification de paramètres nécessite d'itérer un grand nombre de fois, ce qui peut s'avérer lourd dans le cadre de calculs conséquents.

La procédure finalement mise en place est donc une procédure mixte comportant deux phases : une pré-identification à l'aide de modèles à champs moyens, suivie d'une validation, et si besoin d'un ajustement, au moyen de calculs par éléments finis.

2.2.2 Pré-identification par modèle à champs moyens

Brefs rappels concernant les modèles Berveiller-Zaoui et règle en β

Ce paragraphe rappelle brièvement les deux modèles utilisés. Une présentation plus détaillée se situe au chapitre 5.

L'élasticité est considérée isotrope, la description de la microstructure de type auto-cohérente. La description locale du comportement est effectuée grâce à une loi monocristalline. Deux d'entre elles seront ici identifiées : la loi de Tabourot [Tabourot *et al.*, 1997], de type quasi-physique, et celle de Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991], phénoménologique cristalline.

Deux lois d'interaction seront nécessaires à l'identification de la loi monocristalline : la règle en β et le modèle de Berveiller-Zaoui. Elles sont décrites ci-dessous dans le cadre de l'hypothèse des phases sphériques.

Enfin l'homogénéisation est une moyenne spatiale du comportement sur l'ensemble des orientations cristallographiques.

Le modèle de Berveiller-Zaoui [Berveiller et Zaoui, 1979] est obtenu en spécialisant le modèle auto-cohérent de Hill [Hill, 1965] en plasticité, dans les cas des matériaux polycris-

tallins isotropes, pour des chargements monotones et radiaux. En considérant une inclusion élastoplastique sphérique plongée dans un milieu élastoplastique de module approché sécant, la relation d'interaction s'écrit alors :

$$\underline{\sigma}^\varphi = \underline{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\underline{\mathbf{E}}_p - \underline{\varepsilon}_p^\varphi) \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)}, \quad \text{et} \quad \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{E^{Mises}}{\Sigma^{Mises}}, \quad (2.2)$$

où E^{Mises} et Σ^{Mises} sont respectivement la déformation et la contrainte équivalente de von Mises :

$$E^{Mises} = \sqrt{\frac{2}{3}\underline{\varepsilon}_p : \underline{\varepsilon}_p} \quad \text{et} \quad \Sigma^{Mises} = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{\mathbf{s}} : \underline{\mathbf{s}}}. \quad (2.3)$$

L'évolution du module approché considéré permet une bonne prise en compte de l'écrouissage des polycristaux au travers du ratio $\frac{E^{Mises}}{\Sigma^{Mises}}$.

Le modèle dit de la règle en β [Pilvin et Cailletaud, 1994] écrit la loi d'interaction à l'aide d'une variable d'accommodation β^φ comportant un écrouissage lié aux incompatibilités entre grains. Dans le cas d'une morphologie de phases φ sphériques et de l'élasticité isotrope, la règle d'interaction s'écrit alors :

$$\underline{\sigma}^\varphi = \underline{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{\mathbf{B}} - \underline{\beta}^\varphi) \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)}. \quad (2.4)$$

La variable d'accommodation β^φ admet pour loi d'évolution :

$$\dot{\underline{\beta}}^\varphi = \dot{\underline{\varepsilon}}^\varphi - D(\underline{\beta}^\varphi - \underline{\delta}\underline{\varepsilon}^\varphi)\|\dot{\underline{\varepsilon}}^\varphi\| \quad (2.5)$$

D et $\underline{\delta}$ sont deux paramètres à identifier, et qui dépendent de la loi de comportement local, et du type de microstructure dans le cas de grains non-équiaxes.

Procédure de pré-identification

La pré-identification est effectuée à l'aide de la règle en β [Pilvin et Cailletaud, 1994]. Elle présente en effet l'avantage d'avoir une bonne qualité de prédiction du comportement macroscopique y compris en chargements non-proportionnels⁶. La traction à 45° n'est pas prise-en-compte, ne présentant qu'un intérêt relatif pour la procédure. L'identification est donc réalisée dans l'objectif de décrire au mieux l'ensemble des trois autres chargements : traction simple, cisaillement puis traction à 45°, cisaillement puis traction à 0°. A l'instar des chargements expérimentaux, les tractions sont imposées en déformation axiale avec contraintes latérales et de cisaillement nulles. Il en va de même pour le cisaillement. Entre les étapes de cisaillement et de traction, la décharge est un retour à contrainte nulle.

⁶Pour justification, voir le chapitre 6.

```

**load
*segment 100
      time  sig11 sig22 sig33 sig12 eto23 sig31
      0.0 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
      20.0 0.000 0.000 0.000 0.000 0.014 0.000
*segment 100
      time  sig11 sig22 sig33 sig12 sig23 sig31
      0.0 0.000 0.000 0.000 0.000 continue 0.000
      20.0 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
*segment 100
      time  sig11 sig22 eto33 sig12 sig23 sig31
      0.0 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
      20.0 0.000 0.000 0.02 0.000 0.000 0.000

```

FIG. 2.6 – Mise en données du chargement cisaillement puis traction à 0° dans le module « Simulation » du code Zébulon.

La règle en β présente toutefois la difficulté de comporter deux paramètres liés à la transition d'échelles, D et δ , qu'il faut également identifier. Pour s'assurer donc de leur validité, la description du comportement obtenue pour la traction simple est confrontée à la prédiction obtenue avec le modèle Berveiller-Zaoui, qui ne nécessite aucune identification, et ceci avec les mêmes paramètres de loi monocristalline. Si besoin, les valeurs des coefficients de la règle en β sont ajustées. Une synthèse de la procédure est présentée à la figure 2.7.

Lorsque la règle en β est calée, et les trois chargements sont décrits au mieux, la loi monocristalline est considérée comme pré-identifiée. Le jeu de paramètres obtenu peut alors donner lieu à calculs éléments finis pour validation.

2.3 Validation et ajustement par calculs éléments finis

2.3.1 Conditions aux limites appliquées

Les conditions aux limites ont été choisies périodiques⁷ car étant la meilleure représentation d'un volume élémentaire représentatif plongé dans un milieu infini, elles n'engendrent aucune perturbation près des surfaces. Dans le cadre de conditions aux limites périodiques, le champ local de déformations $\underline{\varepsilon}(\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}))$ peut être décomposé en un champ moyen $\underline{\mathbf{E}}$ qui serait le champ si le milieu était homogène et une correction fluctuante $\underline{\varepsilon}'(\underline{\mathbf{x}})$. Ainsi :

$$\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\mathbf{E}} \cdot \underline{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{u}}'(\underline{\mathbf{x}}), \quad \underline{\varepsilon}(\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}})) = \underline{\mathbf{E}} + \underline{\varepsilon}'(\underline{\mathbf{u}}'(\underline{\mathbf{x}})), \quad \underline{\mathbf{u}}' \text{ périodique.} \quad (2.6)$$

⁷Se reporter au chapitre 5 pour le choix et le détail des conditions aux limites.

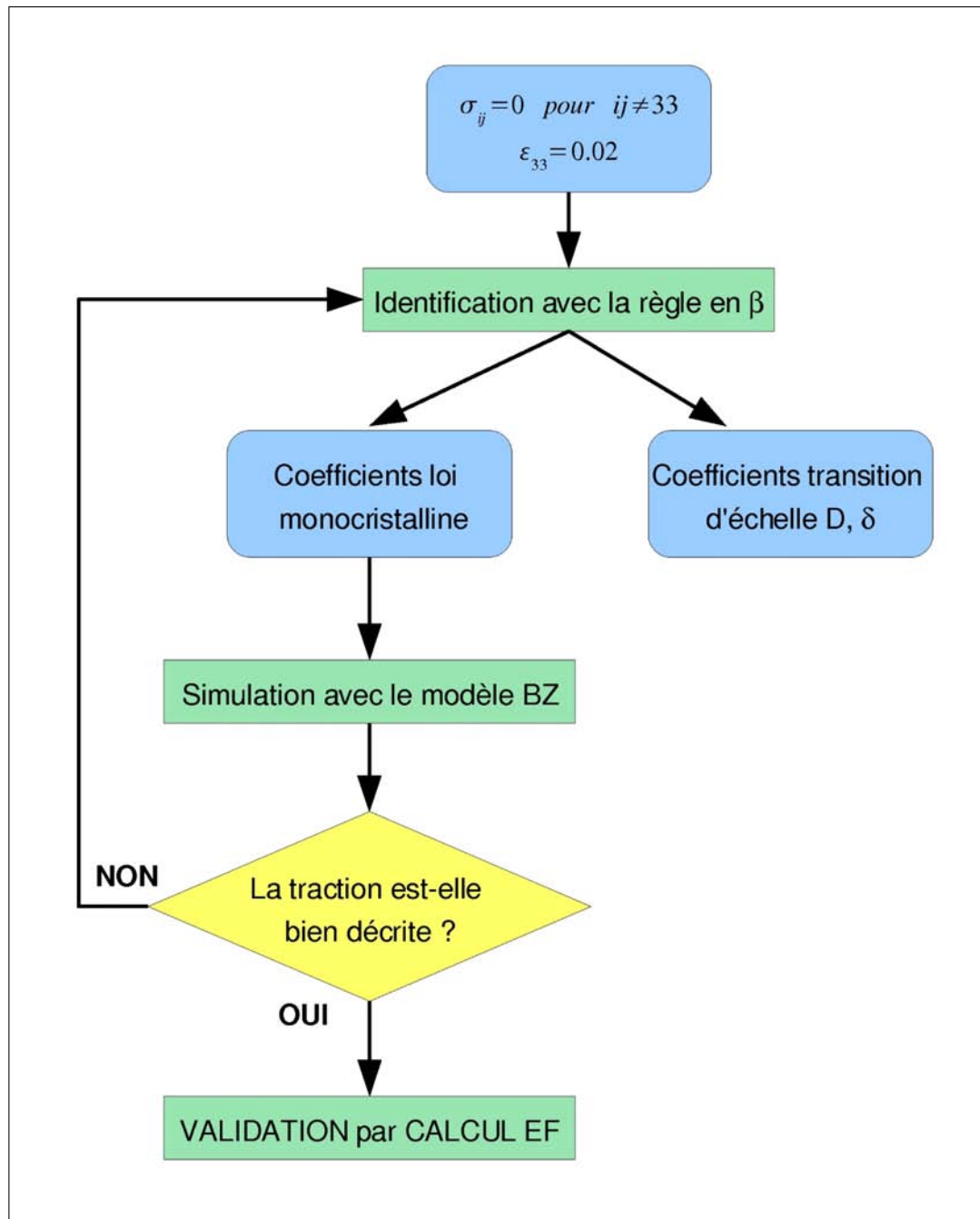


FIG. 2.7 – Procédure de pré-identification des paramètres de la loi monocristalline.

Par « périodicité » de $\underline{\mathbf{u}}'$, il s'entend que toutes les composantes de $\underline{\mathbf{u}}'$ prennent des valeurs identiques aux points du bord de la microstructure. Pour cela, dans chaque groupe de nœuds liés par condition de périodicité, l'un d'entre eux est défini comme « maître », et les autres « esclaves ». Les composantes de $\underline{\mathbf{u}}'$ du nœud maître sont reportées sur les esclaves. Or, dans le cadre d'un calcul parallèle, la microstructure est subdivisée en sous-domaines au sein desquels le problème mécanique est résolu indépendamment, avant raccord des conditions d'interface. Le passage des conditions aux limites périodiques en calcul parallèle⁸ comprend donc le report dans chaque sous-domaine concerné des composantes de $\underline{\mathbf{u}}'$ sur les nœuds « esclaves ».

2.3.2 Microstructure développée

Une microstructure spécifique a été développée afin de s'affranchir au mieux des artefacts de calcul. Cet objectif imposait que la-dite microstructure soit : périodique en raison des conditions aux limites retenues, tridimensionnelle (voir [Musienko, 2005] notamment pour justification), et dotée d'un maillage libre respectant les joints de grains (voir [Barbe, 2000], [Osipov, 2007]).

La microstructure ici obtenue (présentée à la figure 2.8) est constituée de polyèdres de Voronoï non tronqués, et respecte ces caractéristiques. Le fait qu'elle soit dépourvue de surface permet de conserver une qualité de maillage libre parfaitement homogène.

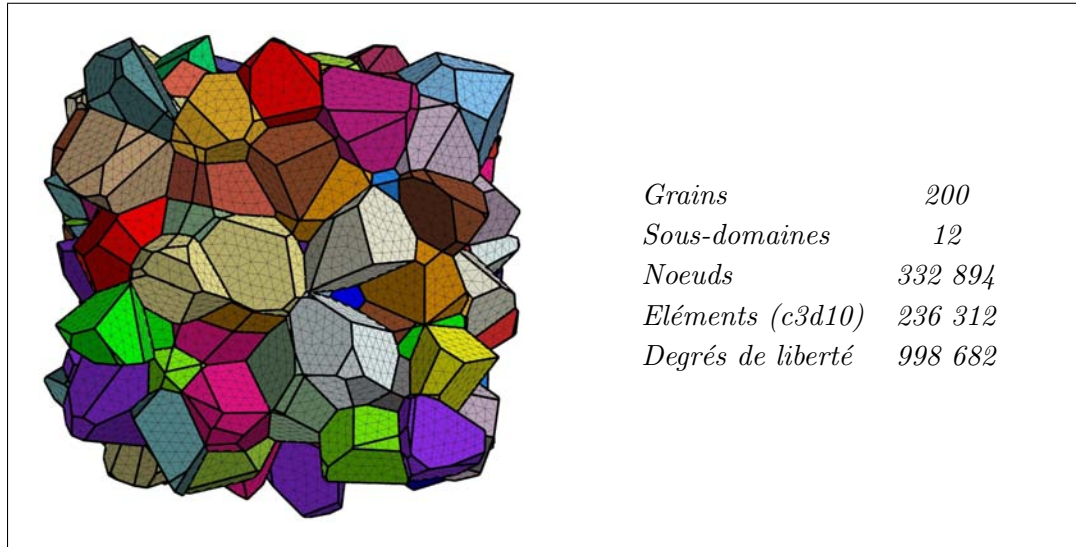


FIG. 2.8 – Maillage tri-dimensionnel périodique utilisé pour la validation de l'identification par calcul éléments finis. La géométrie est composée de polyèdres de Voronoï non coupés. Le maillage respecte les joints de grains. Les éléments utilisés (c3d10) sont tétraédriques quadratiques.

⁸Développement effectué par S.Quilici dans le cadre du code de calcul éléments finis Zébulon.

L'obtention d'un polyèdre de Voronoï passe classiquement par quatre étapes :

1. la distribution aléatoire des germes dans un domaine \mathbb{D} ;
2. la génération des cellules de Voronoï (ici exécutée avec le programme Qhull) ;
3. la génération du maillage surfacique libre (ici avec le programme BLSurf) ;
4. la création du maillage volumique libre, avec éléments tétraédriques quadratiques, (ici avec le programme GHS3D).

Celles-ci ont dues être modifiées et complétées pour l'obtention d'une microstructure périodique.

La distribution des germes doit être suivie d'une réplique en 3D du domaine \mathbb{D} , afin d'imposer la périodicité des cellules à l'étape suivante. En effet, le principe de zones d'influence propre aux polyèdres de Voronoï engendre la même structure dans tous les sous-domaines ainsi constitués, et aboutit donc à une surface périodique pour la microstructure.

La génération des cellules de Voronoï est immédiatement suivie d'une reconstruction des cellules sous forme de bases de données internes. En effet, il s'avère que le programme utilisé génère une géométrie périodique ... à un écart numérique prêt (10^{-8}). Celui-ci est suffisant pour rendre caduque la condition même de périodicité. La base de données ainsi créée permet donc de corriger la définition des arêtes et sommets pour avoir rigoureusement périodicité.

La génération du maillage surfacique libre nécessite elle aussi une correction. L'écart numérique du placement des nœuds lors du maillage des surfaces peut conduire à un écart d'un nœud entre deux faces correspondantes, qui n'ont alors pas le même maillage, comme le montre la figure 2.9. Pour chaque paire de faces en relation de périodicité, l'un des deux maillages est détruit et reconstruit par stricte relation de périodicité sur les nœuds. Le maillage obtenu respecte rigoureusement les conditions de périodicité, tant au niveau topologique que du maillage.

Découpage en sous-domaines. 200 grains sont suffisants pour une bonne description de la texture cristallographique, comme le montre la figure 2.10. Par ailleurs, les caractéristiques de la microstructure permettent la description du volume élémentaire représentatif à l'échelle globale. Cette assertion sera étudiée et vérifiée au chapitre 6.

Cette taille de calcul, avec presque 1 million de degrés de liberté, nécessite de recourir au calcul parallèle (Code Zébulon [Feyel, 1998], méthode de décomposition en sous-domaines

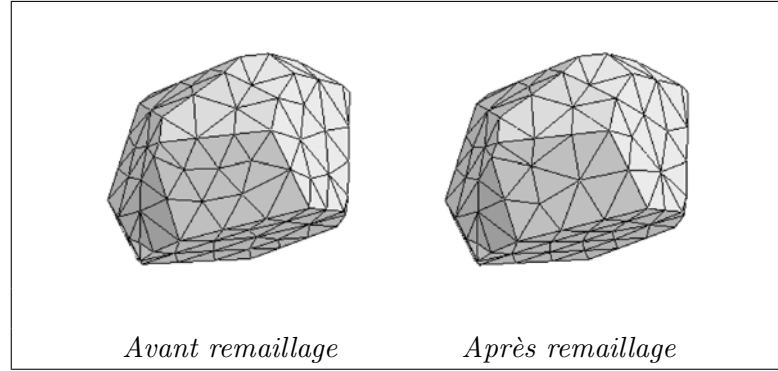


FIG. 2.9 – Remaillage de la moitié de la surface pour s’assurer des conditions de périodicité sur le maillage.

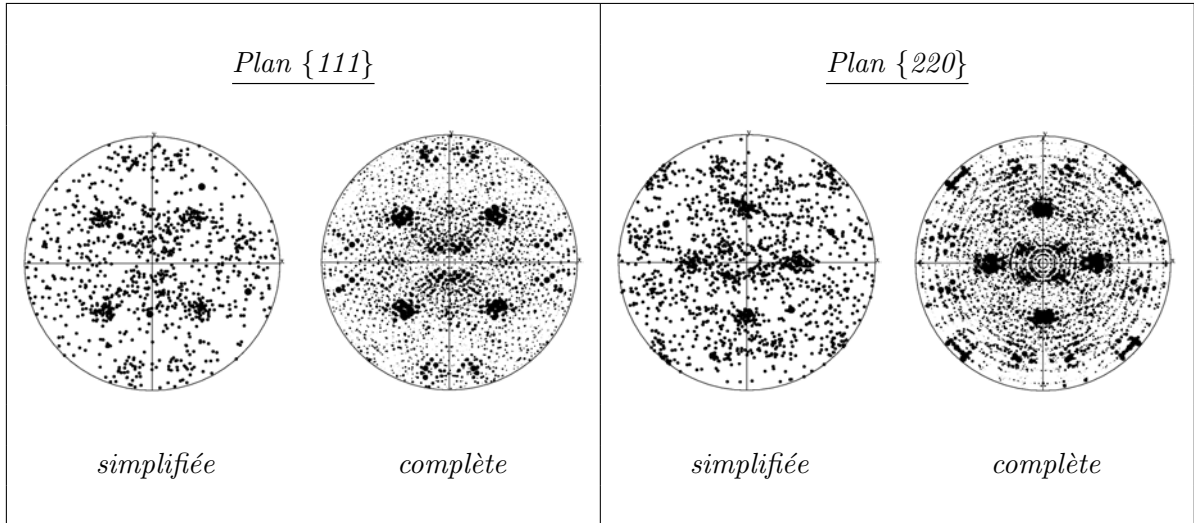


FIG. 2.10 – Comparaison des figures de pôles des textures cristallologiques simplifiées et complètes pour les plans $\{111\}$ et $\{220\}$.

FETI, "*Finite Element Tearing and Interconnecting method*" [Farhat et Roux, 1991], algorithme de résolution « dissection » [Gueye *et al.*, 2007]). Un découpage en sous-domaines conservant les grains entiers a été développé au cours de cette thèse, en coopération avec N.Osipov. Ce-dernier a montré par la suite [Osipov, 2007] que ce découpage améliorait, pour ce type de microstructure, la convergence globale, comparativement à des partitionnements comme ceux obtenus avec METIS [Karypis et Kumar, 1998]. METIS optimise la topologie des interfaces, minimisant la taille du problème et le nombre d'itérations FETI. Mais l'optimisation de la topologie n'engendre pas nécessairement celle de la géométrie. Pour la microstructure ici étudiée, plusieurs problèmes de mécanismes d'origine géométrique ont été alors constatés, diminuant les performances de convergence globale. Le découpage ici utilisé favorise l'optimisation du problème géométrique, au risque de l'être moins en terme de topologie. Le matériau étudié ne présentant pas de forte hétérogénéité des propriétés mécaniques au regard du calcul parallèle, la convergence globale du calcul a été sensiblement améliorée. Le maillage est ici divisé en 12 sous-domaines.

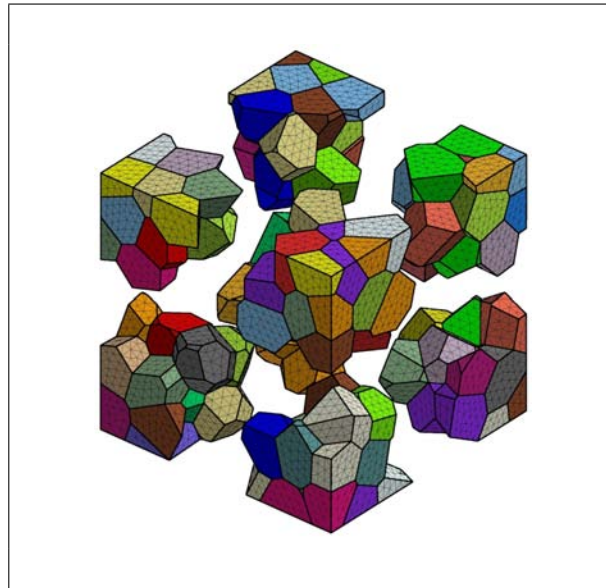


FIG. 2.11 – Découpage en sous-domaines respectant les joints de grains (ici sur un maillage non périodique [Osipov, 2007]).

2.3.3 Définition du chargement et validation de l'identification

En l'état actuel des développements, les conditions aux limites périodiques ne peuvent être imposées qu'en déformation dans le cadre du calcul parallèle. En conséquence, il convient de déterminer, en déformation, le chargement équivalent au chargement réel, c'est-à-dire donnant en réponse des contraintes nulles sur les composantes latérales et de cisaillement, pour une traction simple. L'histoire du tenseur des déformations est ainsi extraite des simulations en champs moyens, puis appliquée comme chargement dans le calcul parallèle par éléments finis, sous forme de table de chargement. A l'issue du calcul, les contraintes latérales (et de

cisaillement dans le cas de la traction) sont contrôlées. Dans le cas où celles-ci ne seraient pas nulles, la table de chargement (*i.e.* le tenseur de déformation imposé) est corrigée en faisant porter la variation sur la partie élastique de la déformation.

Plaçons-nous dans le cadre d'une traction avec déformation axiale imposée selon la direction 1. Le tenseur des contraintes est supposé de la forme⁹ :

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

En appliquant une correction de la contrainte sphérique, il n'y a pas de variation de la déformation plastique. Le tenseur des contraintes recherché est de la forme :

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 + \sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Ainsi, le correctif appliqué sur la déformation est :

$$\Delta \epsilon_2^e = -\sigma_2 \left(\frac{1 - 2\nu}{E} \right). \quad (2.9)$$

Ce procédé est à l'évidence simpliste puisqu'il fait intervenir plusieurs simplifications comme le fait de faire porter la correction sur l'élasticité linéaire seule. Mais sa finalité est de donner une approximation correcte de la modification à apporter à la table de chargement en un minimum d'itérations. Cet ajustement est à coupler avec celui des paramètres de la loi monocristalline. En effet, si la pré-identification était « parfaite », l'application du tenseur des déformations donnerait directement le tenseur des contraintes attendu.

Dans la pratique, la pré-identification s'est avérée d'assez bonne qualité, et n'a nécessité que peu d'ajustements au niveau des calculs éléments finis. Lorsque les *extrema* des valeurs de la contrainte présumée nulle sont strictement compris entre -5 MPa et +5 MPa, la simulation est acceptée compte-tenu du fait que, suivant le chargement étudié, la contrainte axiale maximale est comprise entre 68 et 100 MPa.

L'ensemble de la procédure de validation par calculs éléments finis est résumée sur la figure 2.12.

2.4 Résultats obtenus

2.4.1 Rappel des lois monocristallines étudiées

Pour mémoire (voir chapitre 1), l'identification est effectuée suivant deux lois monocristallines, l'une, quasi-physique, [Tabourot *et al.*, 1997] repose sur la densité totale de dislocations ;

⁹Le cas plus général est présenté en annexe.

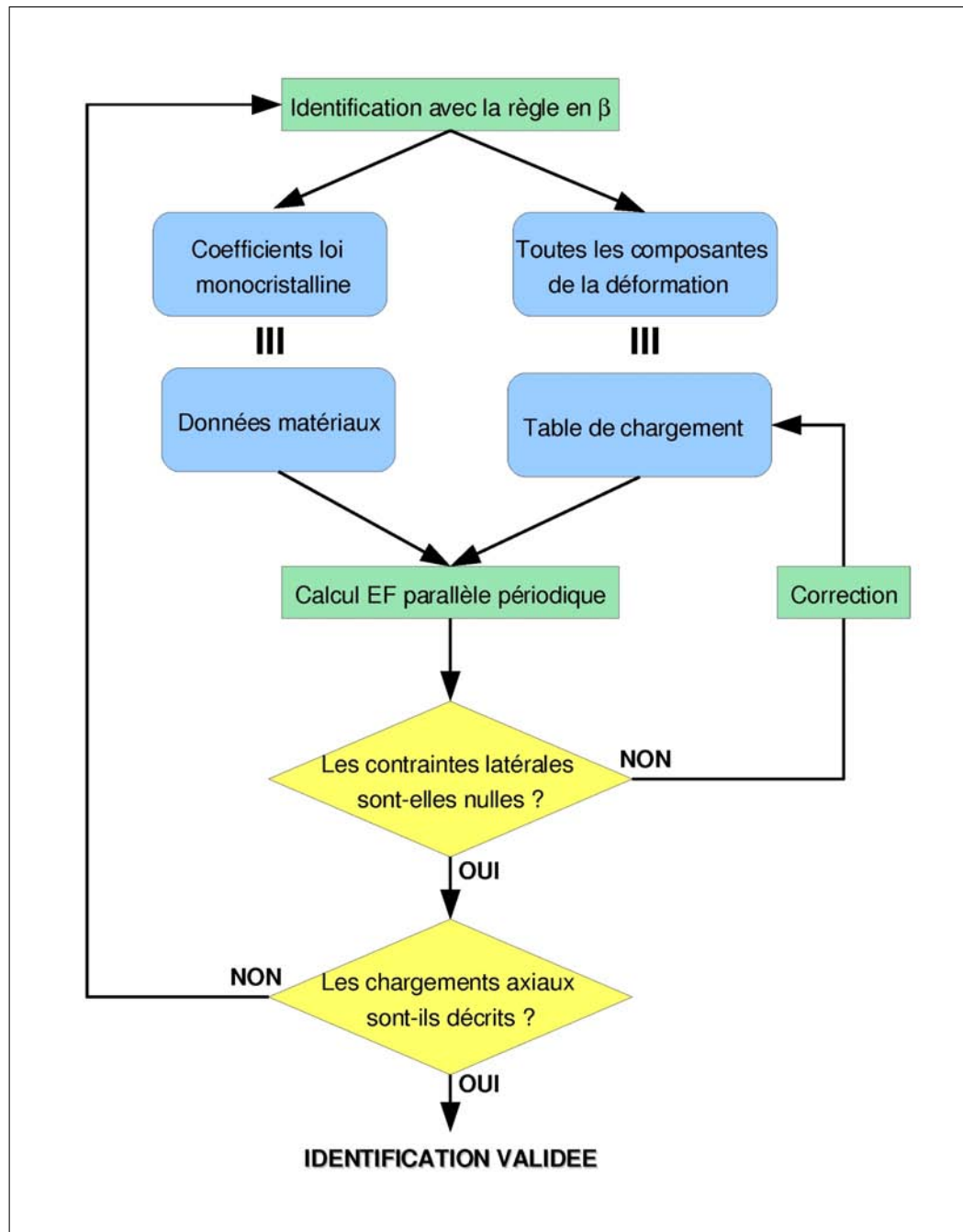


FIG. 2.12 – Procédure de validation de l'identification des paramètres de la loi monocrystalline.

l'autre, phénoménologique cristalline, transpose les notions d'écroutissage cinématique et isotrope à l'échelle du système de glissement [Méric et Cailletaud, 1991]. Les relations constitutives sont rappelées ci-dessous.

– Modèle quasi-physique :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^s}{\tau_\mu^s} \right)^{\left(\frac{1}{m}\right)}, \quad (2.10)$$

$$\tau_\mu^s = \alpha \mu b \sqrt{a^{sp} \rho^p}, \quad (2.11)$$

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left(\frac{\sqrt{a^{sp} \rho^p}}{K} - 2y_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s|. \quad (2.12)$$

– Modèle phénoménologique cristallin :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{K} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - x^s), \quad (2.13)$$

$$x^s = c \alpha^s \quad \text{et} \quad \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d v^s \alpha^s, \quad (2.14)$$

$$r^s = R_0 + Q \sum_r h^{sr} \{1 - \exp(-B v^r)\}. \quad (2.15)$$

2.4.2 Résultats de l'identification

L'estimation obtenue à l'issue de la validation de l'identification est présentée à la figure 2.13. Les chargements en traction simple et orthogonal y sont correctement rendus avec la loi de Tabourot-Teodosiu, très bien avec celle de Méric et Cailletaud.

Le cisaillement suivi d'une traction à 45° est surestimé, mais la rotation du matériau par rapport au chargement, lors de l'étape de traction, n'avait pas été prise en compte dans cette simulation. Cet écart est donc vraisemblablement dû à un impact de texture non décrit dans le calcul effectué ¹⁰.

2.4.3 Analyse des jeux de paramètres obtenus

Loi quasi-physique

La valeur du module de cisaillement μ est prise égal à 45 000 MPa, d'après la littérature. Les paramètres b , m , y_c et $\dot{\gamma}_0$ ne peuvent pas être ici mesurés. En conséquence, les valeurs proposées par Tabourot [Tabourot *et al.*, 1997] lors de son identification sur du cuivre sont conservées.

Madec [Madec, 2001] discute de la valeur du coefficient α , ceci à partir de simulation par dynamique des dislocations. Il retient, pour du cuivre, la valeur moyenne de 0.38 ± 0.04 . Cette

¹⁰La rotation du matériau a bien été décrite dans toutes les autres simulations.

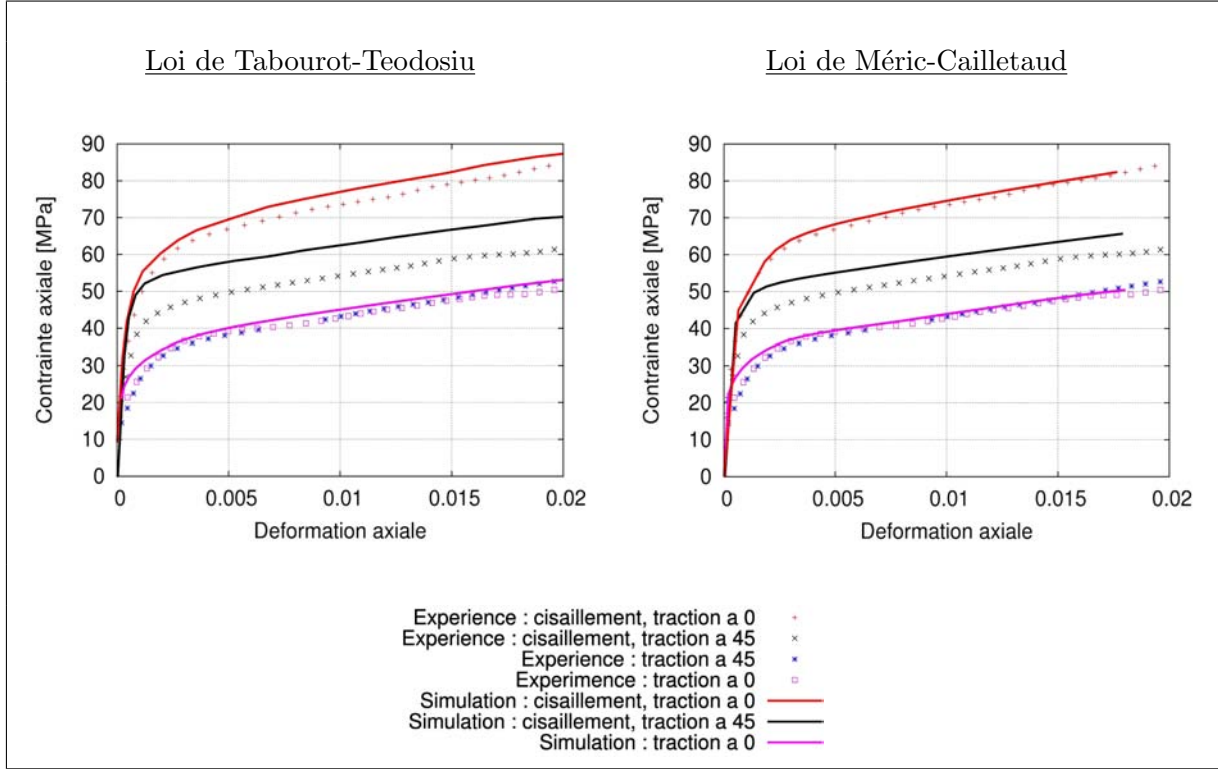


FIG. 2.13 – Identification par calcul éléments finis des lois monocristallines de Tabourot [Tabourot *et al.*, 1997], et de Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991].

valeur sera utilisée ici.

L'identification a donc porté sur :

- la densité initiale de dislocations, définie par les traitements thermomécaniques et l'histoire du matériau utilisé,
- le paramètre K , facteur de proportionnalité entre le libre parcours moyen et la forme quadratique $\sqrt{a^{sp}\rho\rho}$ (a^{sp} matrice d'interaction, ρ densité de dislocation),
- la matrice d'interaction, pour laquelle, rappelons-le, a_0 se rapporte à l'auto-écrouissage, a_1 aux interactions coplanaires, a_2 à la formation de verrous de Hirth, a_3 aux interactions colinéaires, a_4 à la formation de jonctions glissiles, a_5 à celle de verrous de Lomer.

Les valeurs obtenues sont présentées en table 2.2.

Tabourot présente des valeurs de K comprises entre 50 et 76 dans sa thèse [Tabourot, 1992], 38 dans [Tabourot *et al.*, 1997], et 36 dans [Tabourot, 2001]. La valeur de 50 ici obtenue paraît donc acceptable.

Concernant la densité initiale de dislocations, Tabourot, en 1997 [Tabourot *et al.*, 1997], avait identifié un $\rho_0 = 10^{10}m^{-2}$, et en 2001 [Tabourot, 2001] $\rho_0 = 10^8m^{-2}$. Madec [Madec, 2001], utilise une densité initiale de $10^{12}m^{-2}$. Devincere utilise pour ses simulations [Devincre *et al.*, 2006] successivement des densités de $10^{11}m^{-2}$, puis $10^{12}m^{-2}$. La valeur ici identifiée est de $\rho_0 = 4,90.10^{10}m^{-2}$. Celle-ci n'a pas pu être mesurée expérimentalement dans le cadre de notre travail. Il sera donc simplement noté que la valeur obtenue est raisonnable au regard des précédentes identifications.

La matrice d'interaction sera analysée plus bas.

μ (GPa)	b (m)	m	$\dot{\gamma}_0$ (s ⁻¹)	α	ρ_0 (m ⁻²)	y_c	K
45 000	$2.56.10^{-10}$	0.05	10^{-10}	0.38	$4.90.10^{10}$	3.36b	50
a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5		
0.025	0.01	0,04	14.3	0.6	0.5		

TAB. 2.2 – Coefficients de la loi de Tabourot et al. [Tabourot *et al.*, 1997] identifiés sur courbes expérimentales.

Modèle phénoménologique cristallin

L'identification obtenue est présentée au tableau 2.3. L'identification des paramètres de viscosité comporte nécessairement une approximation puisque les essais ne permettent pas une identification adéquat. Les valeurs obtenues sont un peu plus élevées que celles issues de la bibliographie, mais acceptables. La valeur de n a volontairement été prise égale à l'exposant de la loi de Tabourot ($m = 1/n$).

Par ailleurs, concernant le coefficient de saturation B , il a été montré au chapitre 1 que l'on pouvait légitimement s'attendre à une valeur proche du carré du rapport y_c/b issu du modèle de Tabourot. Ici,

$$B = 9 \quad \text{et} \quad \left(\frac{y_c}{b}\right)^2 = 11,29. \quad (2.16)$$

Ce résultat est donc bien cohérent.

viscosité		écrouissage isotrope			matrice d'interaction					
K (MPa.s ^{1/n})	n	R_0 (MPa)	Q (MPa)	B	h_0	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
8	20	4	7	9	1	1	0,2	90	3	2,5

TAB. 2.3 – Coefficients, identifiés sur courbes expérimentales, de la loi phénoménologique cristalline Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991].

Matrice d'interaction

Tout d'abord, il est à noter que les matrices obtenues dans les deux identifications, *i.e.* avec les deux lois monocristallines sont tout à fait similaires. Elles présentent pour caractéristiques principales un coefficient se rapportant aux interactions colinéaires, particulièrement élevé, conformément aux indications pressenties par la dynamique des dislocations. L'ordre $Hirth < Lomer < glissile < colinaire$ est également retrouvé.

La mise en regard analytique présentée au chapitre 1 permet d'envisager la confrontation des valeurs numériques des coefficients des matrices d'écrouissage et d'interaction des modèles

ici identifiés. Rappelons que la relation suivante a été obtenue :

$$h^{sp} \text{ proportionnel à } \xi \cdot (a^{sp})^2, \text{ avec } \xi \text{ une constante.} \quad (2.17)$$

Le tableau 2.4 présente la comparaison correspondante. Il apparaît que les résultats obtenus pour la description des jonctions glissiles et des verrous de Lomer (interactions 4 et 5), sont en très bon accord. Les coefficients se rapportant au verrous de Hirth (interaction 2) sont également assez homogènes. Enfin, l'ordre de grandeur n'est pas respecté pour la description des interactions colinéaires (coefficient 3), mais la tendance est la même : un coefficient beaucoup plus élevé que les autres. Les différences observées s'expliquent par le nombre insuffisant de chargements ici étudiés pour espérer identifier valablement l'ensemble des coefficients de la matrice (y compris ceux de l'auto-écrouissage et des interactions coplanaires). Sans modifier l'ordre des coefficients ici confirmés, cela introduit nécessairement un biais dans la définition des valeurs.

« Numéro de l'interaction »	2	3	4	5
h^{rs}	0.2	90	3	2.5
$\xi * (a^{sp})^2$	0.016	2044.9	3.6	2.5

TAB. 2.4 – Comparaison entre les coefficients identifiés respectivement pour les lois de Tabourot-Teodosiu et de Meric-Cailletaud. Pour les raisons indiquées dans le cadre de la confrontation analytique des modèles présentée au chapitre 1, h^{rs} est ici comparé à $\xi * (a^{sp})^2$, où ξ est une constante égale à 10.

Madec et Devincré ont présenté leurs résultats sous forme de rapport prenant la formation de verrous de Lomer comme référence. Procédons de même pour confrontation. Madec et Devincré utilisant la même loi d'écrouissage que Tabourot, il convient d'élever les rapports au carré pour les comparer à ceux de l'identification de la loi Méric-Cailletaud, comme montré au chapitre 1. La comparaison est présentée au tableau 2.5.

i	2	3	4
Madec : $(a_i/a_5)^2$	0.37	226.79	0.80
Devincré : $(a_i/a_5)^2$	0.14	26.24	1.26
Tabourot-Teodosiu : $(a_i/a_5)^2$	0.006	817.96	1.44
Méric-Cailletaud : h_i/h_5	0.08	36.00	1.2

TAB. 2.5 – Comparaison entre les rapports de chacun des coefficients d'interaction avec celui de la formation des verrous de Lomer. D'après l'analyse présentée au chapitre 1, le carré des coefficients des lois quasi-physiques est comparé aux coefficients eux-mêmes pour la loi phénoménologique. Se reporter au tableau 1.3 (p.18) pour les valeurs des coefficients proposés par Madec et Devincré.

Il apparaît alors que la description des jonctions glissiles est du même ordre de grandeur

pour les différents jeux de paramètres. Excepté pour l'identification de la loi de Tabourot-Teodosiu, les valeurs obtenues pour les verrous de Hirth sont également comparables. Enfin, concernant l'interaction colinéaire, deux modèles présentent des coefficients extrêmement élevés, deux autres plus faibles. Mais dans tous les cas, cette interaction est décrite comme nettement plus forte que les autres.

Concrètement, si un système de glissement intervenant potentiellement dans une interaction colinéaire donnée glisse, alors l'autre système impliqué dans la même interaction ne glisse pas.

2.4.4 Comparaison des simulations avec modèles à champs moyens

Différentes simulations du comportement polycristallin sont conduites, avec les mêmes lois monocristallines ci-dessus identifiées, mais selon différentes transitions d'échelles.

Règle en β

Concernant la règle en β , une fois la loi de comportement monocristalline identifiée, les paramètres D et δ sont, au besoin, légèrement affinés. Les valeurs finalement obtenues sont $D = 425$ et $\delta = 0,035$, indépendamment de la loi monocristalline utilisée.

Les estimations du comportement sont en excellent accord avec les courbes expérimentales, pour les deux lois monocristallines (voir figure 2.14).

Modèle de Kröner

Le modèle de Kröner [Kröner, 1961] considère une inclusion I ellipsoïdale plongée dans un milieu infini, élastoplastique, dans lequel la déformation plastique est uniforme et égale à la déformation plastique macroscopique. La description des interactions intergranulaires repose donc sur la partie élastique de la déformation. Elles sont de fait surestimées. Sous l'hypothèse de phases sphériques, la loi d'interaction s'écrit alors :

$$\boldsymbol{\sigma}^p = \boldsymbol{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)(\mathbf{E}_p - \boldsymbol{\varepsilon}_p^p), \quad (2.18)$$

où $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$ est proche de 0,5 pour un coefficient de Poisson de l'ordre de 0,3.

Les estimations ici obtenues surestiment le comportement pour tous les chargements (voir figure 2.14), résultats non surprenants au regard de la bibliographie.

Estimation par linéarisation affine en formulation viscoplastique

L'estimation par linéarisation affine [Masson, 1998] en formulation viscoplastique s'appuie sur une linéarisation tangente des lois constitutives locales définissant ainsi un milieu linéaire

de comparaison (MLC) thermo-élastique. Localement, le comportement linéarisé dans la phase φ du MLC s'exprime par :

$$\underline{\sigma} = \underline{\mathbf{L}}_{\tilde{tgt}}^{\varphi} : \underline{\xi} + \underline{\tau}^{\varphi}, \quad (2.19)$$

où $\underline{\mathbf{L}}_{\tilde{tgt}}^{\varphi}$ est le tenseur des modules tangents uniforme dans la phase φ , et $\underline{\tau}^{\varphi}$ la pré-contrainte au sein de la même phase. Le comportement global du matériau non linéaire est approché par homogénéisation de la loi de type thermoélastique :

$$\underline{\sigma} = \underline{\mathbf{L}}_{\tilde{}} : \underline{\xi} + \underline{\tau}. \quad (2.20)$$

La formulation ici utilisée ne tient pas compte de l'élasticité. Il s'agit donc nécessairement d'une importante approximation du comportement dans le cadre de notre étude. La formulation élastoviscoplastique de l'estimation affine a été définie pour les chargements complexes par Masson [Masson, 1998]. Mais cette dernière est assez lourde (voir chapitre 5 pour plus de détails). Brenner [Brenner *et al.*, 2002] a proposé une formulation élastoviscoplastique plus accessible, mais elle se limite au cadre des chargements proportionnels.

L'objectif ici est, en premier lieu, de tester la capacité de ce modèle à décrire le sur-écrouissage propre au chargement orthogonal, avec la loi monocristalline identifiée dans ce chapitre. Comme l'indique la figure 2.14, ce point est vérifié. Une légère sous-estimation du comportement est constatée. Il conviendrait toutefois de vérifier ce point avec une formulation plus appropriée.

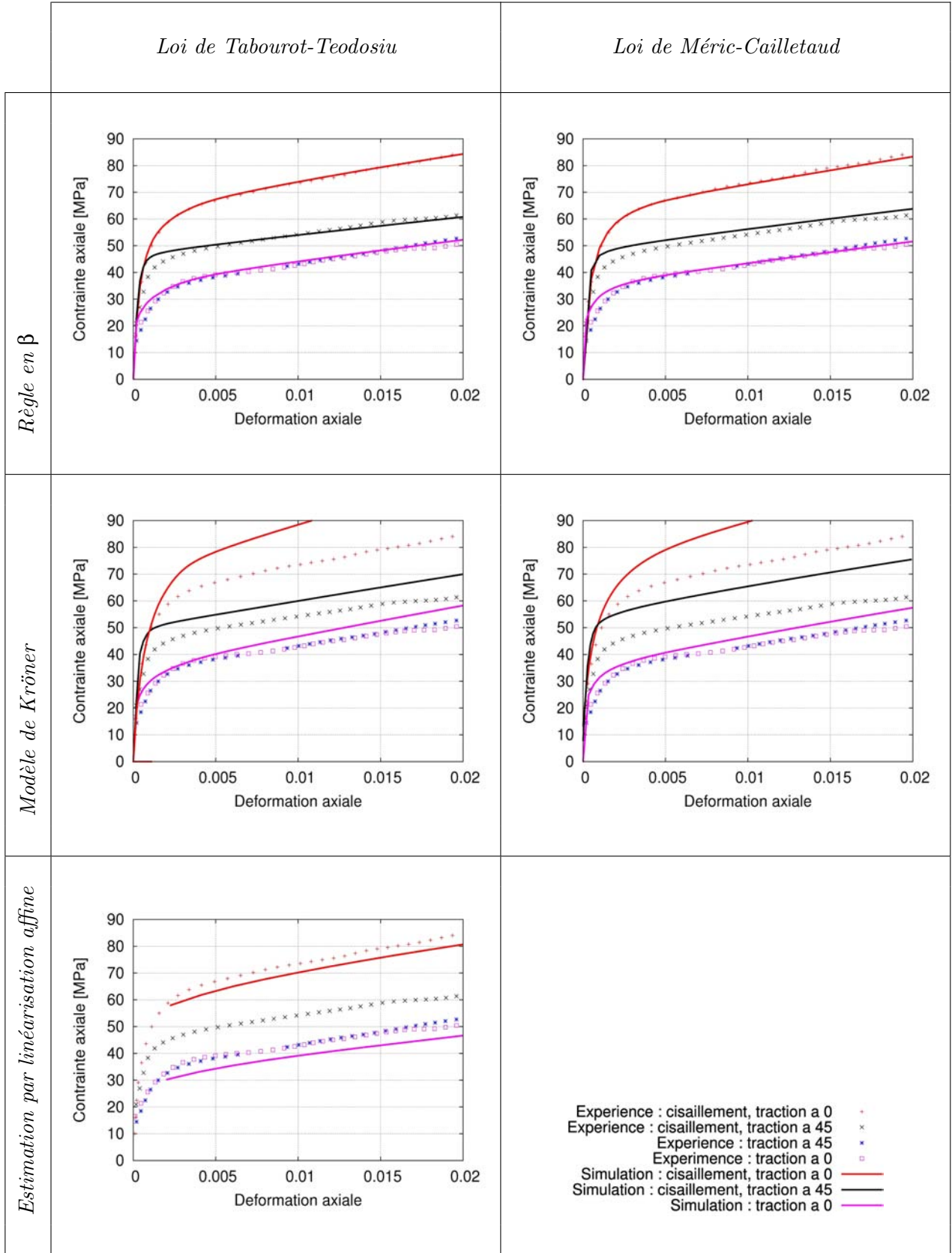


FIG. 2.14 – Estimation du comportement obtenue, pour les deux lois monocristallines, avec la règle en β , le modèle de Kröner, et l'estimation par linéarisation affine (formulation viscoplastique).

En conclusion ...

1. Une méthode d'identification, appliquée à un jeu de trois chargements non proportionnels, dont un chargement orthogonal, est proposée. Elle est effectuée avec un polycristal, et fait intervenir :

- une pré-identification avec le modèle dit de la règle en β [Cailletaud et Pilvin, 1994], lui-même validé par le modèle de Berveiller-Zaoui [Berveiller et Zaoui, 1979] sur une traction simple ;
- une validation par calcul éléments finis parallèles sur un volume élémentaire représentatif périodique.

La microstructure développée pour la validation est tridimensionnelle, périodique, dotée d'un maillage libre respectant les joints de grains.

2. L'identification, ici effectuée sur un cuivre OFHC, est réalisée pour deux lois monocristallines : l'une quasi-physique [Tabourot et al., 1997], l'autre phénoménologique cristalline [Méric et Cailletaud, 1991]. L'accent est mis sur la description des interactions entre systèmes de glissement. Des résultats similaires sont obtenus pour les deux lois.

- Les coefficients de la matrice d'interaction sont classés dans l'ordre :
coplanaire < auto-écrouissage < Hirth < Lomer < glissile < colinéaire.
Ce résultat est en accord avec ceux de Madec et Devincré en dynamique des dislocations [Devincre et al., 2006].
- Il faut, pour les interactions colinéaires, une valeur très nettement supérieure à celle affectée à la formation des verrous de Lomer, sous peine de ne pas décrire correctement le chargement orthogonal.
- Concrètement, si un système de glissement intervenant potentiellement dans une interaction colinéaire donnée glisse, alors l'autre système impliqué dans la même interaction ne glisse pas.

3. Ces identifications de lois monocristallines sont testées avec différentes transitions d'échelles : calculs éléments finis, règle en β , modèle de Kröner, estimation par linéarisation affine en formulation viscoplastique. Toutes présentent des résultats cohérents sur l'ensemble des chargements, et pour les deux lois monocristallines. Comme attendu, le modèle de Kröner surestime le comportement macroscopique. L'estimation par linéarisation affine, dans la formulation ici utilisée (l'élasticité n'est pas ici décrite), le sous estime légèrement. Règle en β et calculs éléments finis en donnent une bonne description.

Le sur-écrouissage propre au chargement orthogonal est bien rendu pour l'ensemble des transitions d'échelles testées, ce qui confirme l'identification monocristalline.

Deuxième partie

La localisation de la déformation : une échelle médiane

Chapitre 3

Analyse bibliographique

« Il faut reconnaître que la nature est très artiste.
La loi des contrastes, elle la pratique ; en grand d'ailleurs, comme tout ce qu'elle fait. »
Jules Verne (1828-1905), *Le secret de Wilhelm Storitz*

*D*eux techniques, utilisées par la suite dans notre travail, sont tout d'abord rappelées dans ce chapitre. Il s'agit des mesures de champs, par corrélation d'images, sous microscope électronique à balayage, et de la représentation de microstructures en vue de calcul par éléments finis.

Une analyse de quelques études de localisation de la déformation, à l'échelle mésoscopique, est ensuite proposée.

Rappelons tout d’abord que l’ensemble de ce travail est placé dans le cadre des faibles déformations. En conséquence, les utilisations des mesures de champs dans le cadre d’études de l’endommagement ne sont pas mentionnées dans l’analyse bibliographique qui suit. De même, les thématiques ayant trait aux grandes transformations sont au mieux simplement citées à titre bibliographique.

L’échelle d’étude abordée ici porte sur une longueur caractéristique d’environ une vingtaine de grains (soit une surface d’environ 400 grains). A ce niveau, les phénomènes intracristallins tels que les murs de dislocations ne sont plus perceptibles. Pour autant cette taille n’est pas totalement suffisante pour que le domaine soit considéré comme un VER.¹ Il s’agit d’une échelle intermédiaire, avec ses études propres, telles notamment celles se rapportant aux phénomènes des bandes de localisation transgranulaires.

Les mesures de champs, ont permis à ce jour, quatre types d’études à cette échelle :

- la mise en évidence et la caractérisation expérimentale des mécanismes élémentaires de déformation et des modes de localisation de la déformation,
- la confrontation entre les observations expérimentales en matière d’hétérogénéité de la déformation et les prévisions des modèles à champs moyens à ce niveau (à condition que le VER soit atteint),
- la confrontation des champs expérimentaux à ceux issus des calculs éléments finis, dans le but d’améliorer la définition du problème éléments finis, et d’atteindre des informations difficiles à obtenir expérimentalement,
- l’identification du comportement par un couplage mesures de champs / calculs éléments finis.

Ces quatre axes supposent des développements dans deux directions :

1. la mise en œuvre des mesures de champs,
2. la représentation de la microstructure pour la réalisation des calculs éléments finis.

Nous commencerons donc par un point succinct sur ces deux techniques avant de revenir sur les résultats obtenus dans les approches mentionnées ci-dessus. La confrontation entre observations expérimentales et prévisions des modèles à champs moyens, en matière d’hétérogénéité de déformation, n’a pas été abordée dans cette thèse. Cette thématique n’apparaît donc pas dans cette courte synthèse bibliographique. Pour autant, il est possible de se rapporter avec profit aux références [Bornert *et al.*, 1993], [Bornert, 1996].

¹Se reporter au chapitre 6 pour une réflexion sur la notion de VER en approche numérique.

3.1 Mesures de champs par corrélation d'images numériques acquises sous microscope électronique à balayage

Les méthodes d'extensométrie par analyse d'images s'appuient sur la comparaison d'une paire d'images prises avant et après déformation (voir figure 3.1). Le champ de déplacement entre ces deux configurations est déterminé de façon discrète en évaluant le mouvement d'un certain nombre de repères répartis sur la surface observée. Seules les composantes planes du champ de déplacement sont obtenues (hormis l'utilisation de la stéréoscopie).

Ces méthodes sont utilisables à différentes échelles : les moyens d'observation vont de la caméra CCD au microscope électronique à balayage, voire au microscope à force atomique (AFM). Le marquage doit être adapté à l'échelle d'observation. Il peut s'agir de l'état naturel de la surface du matériau si celle-ci est suffisamment irrégulière, d'un mouchetis de peinture, d'un dépôt métallique, d'un gravage mécanique ou chimique, ou d'un dépôt de grille par microlithographie.

La technique de mesure actuellement la plus utilisée est la corrélation d'images. Elle consiste à déterminer un champ de déplacement à l'aide de deux images, l'une dite de référence, acquise à un instant initial, et l'autre, dite déformée, acquise à l'instant considéré. Une zone d'étude est définie sur l'image de référence. La zone correspondante, *i.e.* la plus ressemblante, est recherchée sur l'image déformée à l'aide des niveaux de gris. La ressemblance entre ces deux zones est caractérisée par le coefficient de corrélation. Sa minimisation par rapport aux paramètres décrivant une transformation locale détermine l'homologue déformé de la zone d'étude considérée.

La totalité de l'image est ainsi séquencée en zones d'étude, repérées par leurs coordonnées en pixels dans l'image. Les déplacements locaux sont définis par différence de coordonnées des centres des zones d'étude considérées², à un mouvement de corps solide près. Les déformations sont ensuite calculées par dérivation discrète.

L'appariement des zones d'étude nécessite : la définition du coefficient de corrélation, l'approximation de la transformation matérielle, la minimisation du coefficient de corrélation.

3.1.1 Les différents marquages

Marquage. Compte-tenu de l'échelle de mesure visée, l'espacement entre les repères permettant la corrélation d'images ne doit pas dépasser quelques micromètres. De plus, le marquage doit être visible au MEB. En conséquence, le type de repère le plus fréquemment utilisé en micromécanique est la microgrille déposée par microélectrolithographie. La microgrille présente, qui plus est, l'avantage de laisser la microstructure du matériau visible. Cette microgrille peut être en or, platine, nickel ou argent. Le choix se fait selon le contraste avec le matériau support et la température à laquelle les essais sont menés. La figure 3.2 présente le protocole

²Des formulations plus complètes utilisent le déplacement en tout pixel.

d'obtention de la grille. Le motif de la grille est obtenu avec un double balayage du MEB, séparé par une rotation du faisceau de 90° . La définition du nombre de lignes associée au choix du grandissement impose le pas de la grille.

Acquisition. Les images numériques sont enregistrées pendant l'essai mécanique par le système de numérisation. Pour obtenir un appariement correct des points homologues, il est nécessaire de s'assurer que le contraste est optimal en traçant l'histogramme des niveaux de gris (voir figure 3.3). Ce contrôle est surtout nécessaire au moment de la première acquisition. De faibles variations de contraste et de brillance surviennent par la suite : elles sont dues aux fluctuations de l'électronique du MEB et aux variations des propriétés du matériau sous irradiation. Leur influence sur les résultats de la corrélation est faible car la forme du coefficient de corrélation intègre ces variations dans sa formulation.

3.1.2 Les coefficients de corrélation

Le coefficient de corrélation permet de quantifier le niveau de ressemblance de deux zones situées dans un domaine. Son optimum (minimum ou maximum selon la formulation) détermine la zone d'étude homologue à l'état de référence et caractérise la transformation matérielle liant les deux domaines. Principalement deux formulations de ce coefficient sont habituellement utilisées, l'une basée sur les moindres carrés, l'autre utilisant une formulation de type produit scalaire. C'est cette dernière qui sera utilisée³.

Le coefficient de corrélation s'écrit donc sous la forme :

$$C_1 = \sum_{i \in D} f(X_i) \cdot g(x_i), \quad (3.1)$$

où : X_i, x_i sont les coordonnées des pixels dans les images de référence et déformée, $f(X_i), g(x_i)$ les niveaux de gris dans les images de référence et déformée, D le domaine de corrélation. C_1 est donc le produit scalaire des deux vecteurs \vec{F} et \vec{G} , composés des niveaux de gris des deux domaines de corrélation homologues. Il est possible de normaliser C_1 , et de raisonner sur un coefficient de corrélation compris entre 0 et 1, qu'il s'agit ensuite de minimiser. D'où l'expression suivante :

$$C_2 = 1 - \frac{\sum_{i \in D} f(X_i) \cdot g(x_i)}{\sqrt{\sum (f(X_i))^2} \sqrt{\sum (g(x_i))^2}}. \quad (3.2)$$

L'instabilité électronique du MEB, et l'évolution des propriétés du matériau sous irradiation, engendrent des fluctuations de la brillance et du contraste, nécessitant un réajustement avant acquisition de l'image. Il s'agit donc de répercuter l'incidence de cette faible variation sur le coefficient de corrélation.

Soient $g'(x_i)$ les nouveaux niveaux de gris de l'image déformée après ces perturbations. Cette évolution du contraste et de la brillance peut être modélisée sous forme affine :

³dans le cadre du logiciel *Correlmanuv*, développé au LMS par M.Bornert.

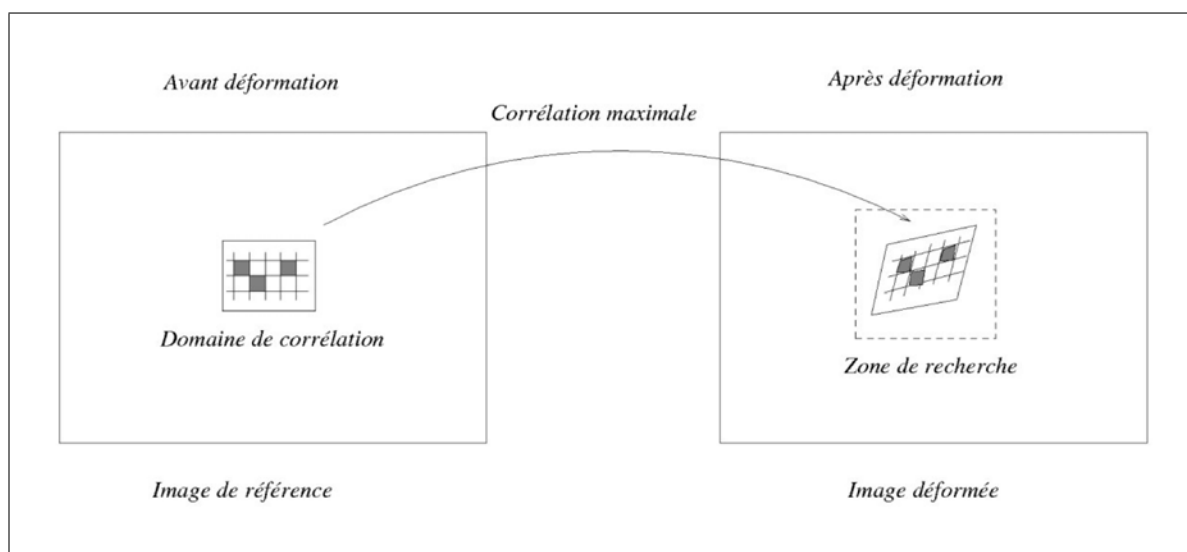


FIG. 3.1 – Principe de la méthode de corrélation.

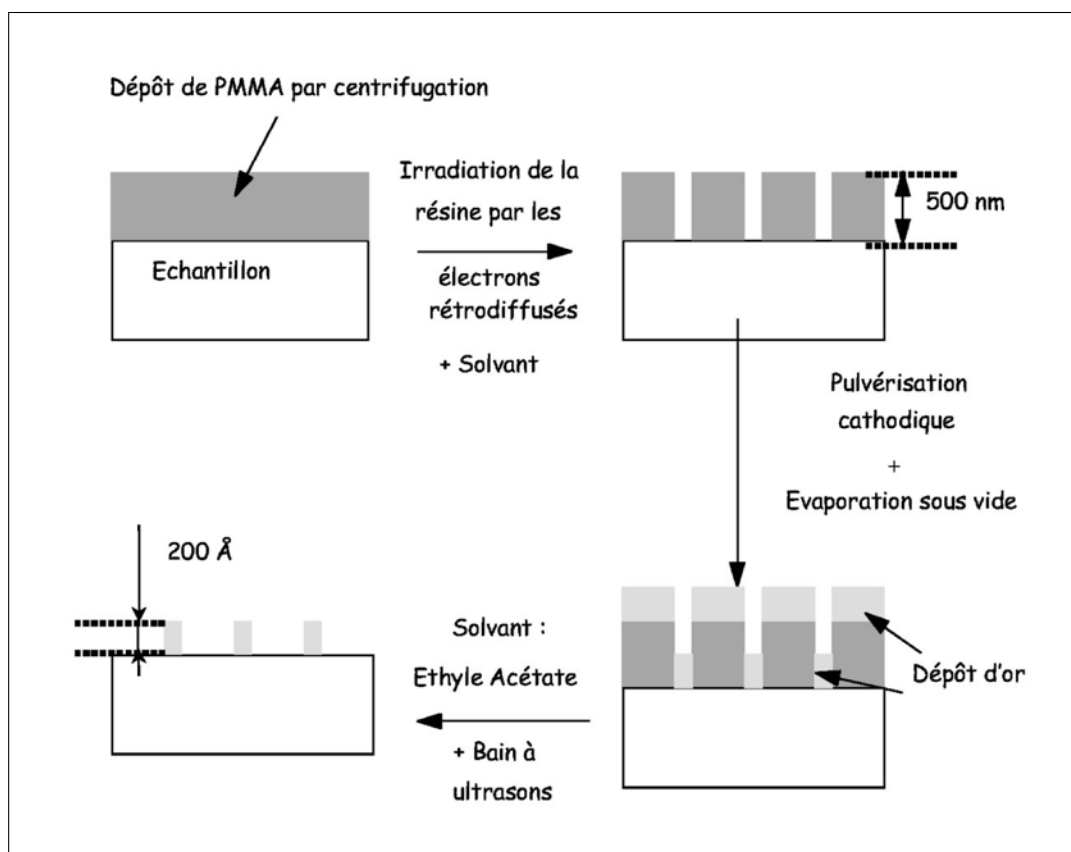


FIG. 3.2 – Principe du marquage par microélectrolithographie [Doumalin, 2000].

$$g'(x_i) = a.g(x_i) + b, \quad (3.3)$$

où a représente la variation de contraste et b celle de brillance. Pour s'affranchir de ces variations, il est nécessaire de retrancher à chaque valeur de niveau de gris la moyenne sur le domaine de corrélation. Donc, en posant :

$$\bar{f}_D = \frac{1}{N} \sum_{i \in D} f(X_i) \quad \text{et} \quad \bar{g}_D = \frac{1}{N} \sum_{i \in D} g(x_i), \quad (3.4)$$

l'expression de C finalement utilisée est :

$$C_3 = 1 - \frac{\sum_{i \in D} (f(X_i) - \bar{f}_D)(g(x_i) - \bar{g}_D)}{\sqrt{\sum (f(X_i) - \bar{f}_D)^2} \sqrt{\sum (g(x_i) - \bar{g}_D)^2}}. \quad (3.5)$$

L'optimum de ce coefficient, qui varie entre 0 (similitude parfaite) et 2 (inversion de contraste parfaite), est insensible aux coefficients a et b .

Pour une revue plus complète sur les différents facteurs de corrélation possible, se reporter à [Doumalin, 2000], [Bornert, 2007].

3.1.3 Approximation de la transformation matérielle

Pour calculer le coefficient de corrélation ci-dessus exprimé, il faut proposer une estimation de la transformation matérielle permettant d'obtenir les coordonnées des points de l'image déformée x_i à partir de celles des points de l'image de référence X_i . Sa forme n'étant pas connue, elle est approchée localement (la méthode de corrélation classique fait appel à deux domaines de faibles tailles). Notons Φ la transformation correspondante. Soient : X_0 la position d'un point dans l'image de référence, D le domaine de corrélation associé à X_0 (et dont il est généralement le centre), X la position d'un point de D , $u(X)$ le déplacement au point X . Φ s'exprime alors :

$$\Phi(X) = X + u(X), \quad (3.6)$$

qui s'approxime en faisant le développement limité de $u(X)$ au voisinage du point X_0 :

$$\Phi(X) = X + u(X_0) + \frac{\partial u}{\partial X}(X_0)(X - X_0) + \frac{1}{2}(X - X_0) \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial X^2}(X_0)(X - X_0) + o(X - X_0)^2. \quad (3.7)$$

Suivant l'ordre auquel l'équation 3.7 est tronquée, différentes approximations sont disponibles, définissant autant de méthodes de corrélation. Citons simplement la troncature à l'ordre 0 : la transformation est alors une translation,

$$\Phi(X) = X + \underline{\mathbf{T}}(X_0) \quad \text{avec} \quad \underline{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} T_x \\ T_y \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

ou, à l'ordre 1,

$$\Phi(X) = X_0 + \underline{\mathbf{T}}(X_0) + \underline{\mathbf{F}} \cdot (X - X_0) \quad \text{avec} \quad \underline{\mathbf{F}} = \underline{\mathbf{1}} + \frac{\partial u}{\partial X}(X_0). \quad (3.9)$$

Les résultats expérimentaux ont été obtenus avec l’une ou l’autre de ces formulations. La technique de corrélation utilisée vise donc à déterminer 2 ou 6 coefficients caractérisant une telle transformation, par l’optimisation du coefficient de corrélation vis-à-vis de ces paramètres.

3.1.4 Interpolation du coefficient de corrélation discret

Les images étant définies de manière discrète et la transformation donnant x en fonction de X étant continue, se pose la question de la détermination du niveau de gris $g(x_i)$. L’approche la plus simple consiste à approcher Φ par une translation définie en valeurs entières de pixels de sorte que les coordonnées de x_i soit entières (en pixels). Mais ceci ne donne accès qu’à une précision au pixel près, en général insuffisante pour les petites déformations.

Pour atteindre des valeurs non entières de déplacements alors que l’image numérique est définie par un échantillonnage en valeurs entières, une interpolation est requise. Cette dernière se fait généralement sur les niveaux de gris (interpolation bilinéaire ou bicubique). Les résultats présentés par la suite ont été obtenus par interpolation bilinéaire.

3.1.5 Le calcul des déformations

Les déformations locales sont calculées à partir des déplacements de chaque intersection de grille au moyen d’un schéma de dérivation discrète (calcul développé dans [Allais *et al.*, 1994], [Bornert, 1996]). La déformation, en un point donné, est calculée à partir de la moyenne du gradient de transformation sur un petit voisinage délimité par la position des intersections de grille voisines dans les deux images. Elle est calculée par une intégrale de contour sur tout le domaine analysé. La figure 3.4 indique les domaines d’intégration disponibles avec le logiciel *Correلمانuv*, utilisé dans cette thèse. Plus le domaine est large plus la précision est grande, mais la signification est moins locale.

3.1.6 Incertitudes

La description des sources d’incertitudes est ici succincte. Pour plus de précisions, se reporter à [Bornert, 2007], [Doumalin, 2000], [Doumalin et Bornert, 2000] et [Racine, 2005].

Le marquage peut être plus ou moins bien adapté à la technique de corrélation d’images. En effet, la qualité du traitement des images par corrélation dépend du contraste et des gradients de niveaux de gris disponibles dans l’image. Ces derniers ne sont pas optimaux dans le cas d’un marquage par micro-grille, contrairement au marquage par mouchetis présentant un contraste plus riche. L’incertitude induite sur la mesure de déplacement est d’environ $5/100^e$ de pixel,

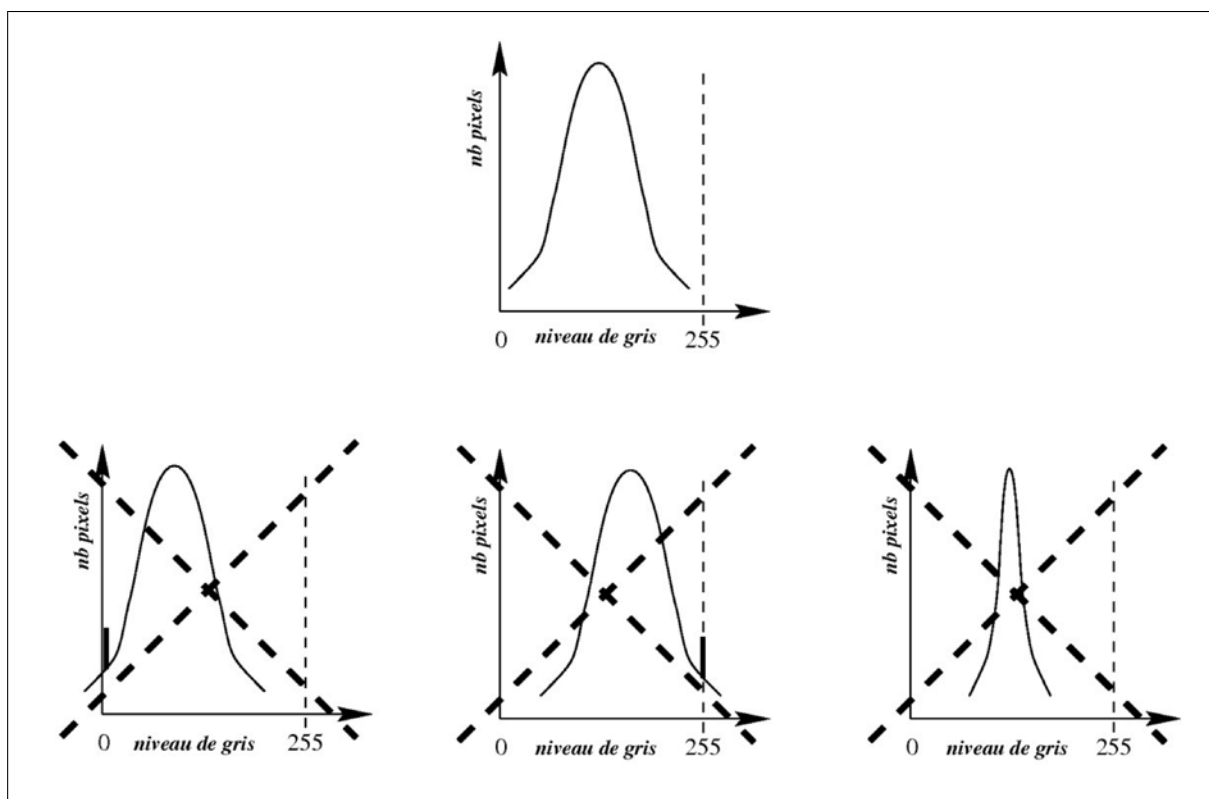


FIG. 3.3 – Sélection d'un histogramme idéal pour la corrélation d'images [Doumalin, 2000].

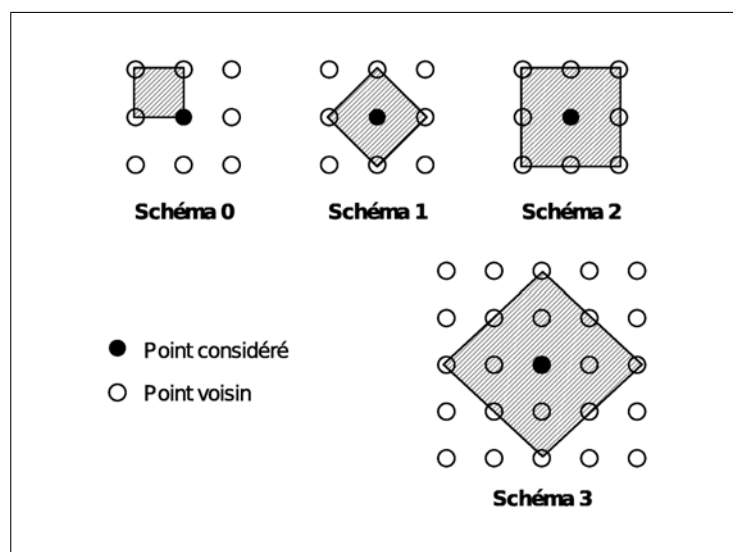


FIG. 3.4 – Domaines d'intégration utilisés [Bornert, 1996].

sous l'hypothèse d'images parfaites. Le marquage doit également être bien résolu : il faut au moins 3-4 pixels par barreau de grilles.

Le bruit des images MEB, supérieur à celui des images issues de caméras optiques, est aussi un facteur limitant. Pour en limiter l'effet, il convient d'utiliser des temps d'intégration par pixel relativement longs, ce qui induit des durées d'acquisition d'images de haute définition (4K x 4K pixels utilisée dans ce travail) de l'ordre de 15 minutes.

Les aberrations de pilotage de la carte de numérisation engendrent deux types d'erreurs. D'une part, des phénomènes d'hystérésis engendrent des non uniformités de balayage après un retour du faisceau en début de ligne, qui induisent des distorsions. La zone affectée reste toutefois faible (une centaine de pixels).

D'autre part, la précision locale des mesures est entachée des imprécisions locales de pilotage. La commande de position du faisceau d'électrons est codée sur 12 bits (4 096) avec une imprécision de $\pm 0,3$ bit. Elle se traduit par une erreur de mesure du champ local de déplacement de 0,3 pixel, dans une image 4k x 4k pixels, qui apparaît sous forme de bandes horizontales et verticales régulièrement espacées sur les cartes de déformations.

La dérive de faisceau lors du balayage d'une image est amplifiée par la durée d'acquisition. Cette dérive est due aux phénomènes d'hystérésis dans les lentilles électromagnétiques du MEB, ou éventuellement aux mouvements de la platine porte-objet, ou à la relaxation des échantillons sous charge en cas d'essai *in situ*. L'acquisition des images de haute résolution étant lente, 15 min dans la configuration utilisée dans cette thèse, un décalage entre le haut et le bas apparaît. Cette dérive est généralement beaucoup moins sensible horizontalement, le temps entre l'acquisition de deux pixels situés sur la même ligne étant beaucoup plus court que celui entre deux pixels d'une même colonne à la même distance, le rapport des deux durées étant le nombre de pixels par ligne (i.e. 4 096).

Le grandissement du MEB varie au cours des essais. Ce grandissement peut introduire une déformation isotrope apparente de l'ordre de 1% sur le MEB utilisé. Ce sont ces erreurs géométriques globales (variations de grandissement, dérive), ou locales (imperfection du balayage), qui limitent actuellement l'utilisation de l'extensométrie sous MEB en petites déformations. Des corrections sont possibles, mais très lourdes à mettre en œuvre en pratique [Cornille, 2005].

Erreur sur la mesure du gradient de transformation F à partir de la mesure de déplacement. L'incertitude sur \mathbf{F} est liée à la base de mesure, donc au schéma d'intégra-

tion choisi. L'évaluation de cette erreur est détaillée dans [Doumalin, 2000]. Doumalin indique les expressions des incertitudes pour les différents schémas d'intégration, ainsi que le gain de précision et la perte du caractère local de la mesure par rapport au schéma d'intégration 0. Lorsque la taille d'un domaine d'intégration augmente, le calcul prend d'avantage de points de mesure répartis sur une zone plus grande. Les fluctuations locales sont alors moyennées.

Schéma d'intégration	0	1	2	3
Gain de précision	1	2	3,26	4,61
Perte du caractère local	1	$1/\sqrt{2}$	$1/2$	$1/2\sqrt{2}$

TAB. 3.1 – Incertitude sur la mesure de transformation à partir de la mesure de déplacement, d'après [Doumalin, 2000]. Les schémas d'intégration sont rappelés à la figure 3.4.

Par ailleurs, l'évaluation du gradient de transformation est également affectée par l'incertitude due aux variations de grandissement du MEB, et des erreurs dues aux distorsions. Ces dernières sont négligeables si les points sont proches. Pour ce qui est de l'impact des variations du grandissement, il peut être évalué selon :

$$F_{xx} = \left(1 + \frac{\Delta g}{g} \right) \frac{\partial x}{\partial X}, \quad (3.10)$$

où g est le grandissement, x les coordonnées exactes des points dans la configuration déformée, et X celles dans la configuration initiale.

Approximations dans le calcul de déformation à partir du gradient de transformation. La technique de corrélation permet de mesurer la projection des déplacements dans le plan d'observation, mais ne donne pas accès à la composante hors plan (excepté la corrélation 3D, ou stéréocorrélation, non évoquée ici). Le gradient de la transformation est donc partiellement déterminé :

$$F = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & ? \\ F_{21} & F_{22} & ? \\ ? & ? & ? \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Pour déterminer le tenseur de Green-Lagrange, deux hypothèses sont formulées. Ainsi, il est supposé que l'axe 3 est normal au plan de l'image, et que le déplacement dans cette direction est constant dans le plan. Le tenseur linéarisé de Green-Lagrange s'écrit alors :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

La composante ε_{33} peut être calculée sous trois hypothèses : déformation axisymétrique, isochore, ou plane.

3.2 Génération des microstructures représentatives

La confrontation entre champs expérimentaux et calculés par la méthode des éléments finis nécessite de bien décrire la microstructure du matériau.

3.2.1 Importance de la troisième dimension

Les premières microstructures développées pour confrontation aux champs expérimentaux correspondaient à une cartographie EBSD en surface avec des grains simplement extrudés selon la troisième dimension. Plusieurs études ont par la suite montré les insuffisances de ces modélisations : [Musienko, 2005], [Musienko *et al.*, 2007], [Zeghadi, 2005], [Hériprié, 2006], [Libert, 2007] ... Il convient donc d'adopter une description de la microstructure dont la troisième dimension soit représentative du matériau.

3.2.2 Microstructure réelle

Les techniques expérimentales actuelles, telle la microtomographie, ouvrent la porte aux représentations réelles de microstructures. Pour autant, cette technique reste très coûteuse en temps et moyens, et n'est pas à ce jour disponible pour tous les matériaux. Les techniques de microtomographie aux rayons X mettent en évidence la structure tridimensionnelle de matériaux au contraste entre phases suffisant. Un exemple en est donné à la figure 3.5 ([Madi, 2006], [Forest *et al.*, 2006]).

Une solution alternative est la reconstruction couche par couche d'un échantillon par polissages et cartographies EBSD [Rey *et al.*, 2006]. Toutefois ce procédé présente l'inconvénient de détruire l'échantillon, et surtout d'être très fastidieux. Sur ce point des progrès sont donc espérés avec l'arrivée des techniques d'érosion ionique des échantillons *in situ*, bien qu'elles se limitent à de petites zones (voir par exemple [Lee *et al.*, 2007]).

Cette démarche a néanmoins été mise en œuvre dans [Musienko *et al.*, 2007]. Un échantillon de cuivre a subi après essai une succession de cartographies EBSD et polissages électrolytiques afin de pouvoir reconstruire la microstructure sur une épaisseur de 100 μm . D'une part cette technique n'a permis de décrire qu'une couche de grains, d'autre part l'échantillon étant analysé *post-mortem*, la microstructure décrite est celle après déformation. Malgré ces deux approximations, Musienko [Musienko *et al.*, 2007] obtient un bon accord entre champs expérimentaux et simulés en utilisant un maillage 3D libre, respectant les joints de grains, et suffisamment fin (voir figure 3.6). En réalisant le même calcul pour différentes finesses de maillage, il montre que ce paramètre influe sensiblement sur l'impact du choix des conditions aux limites appliquées.

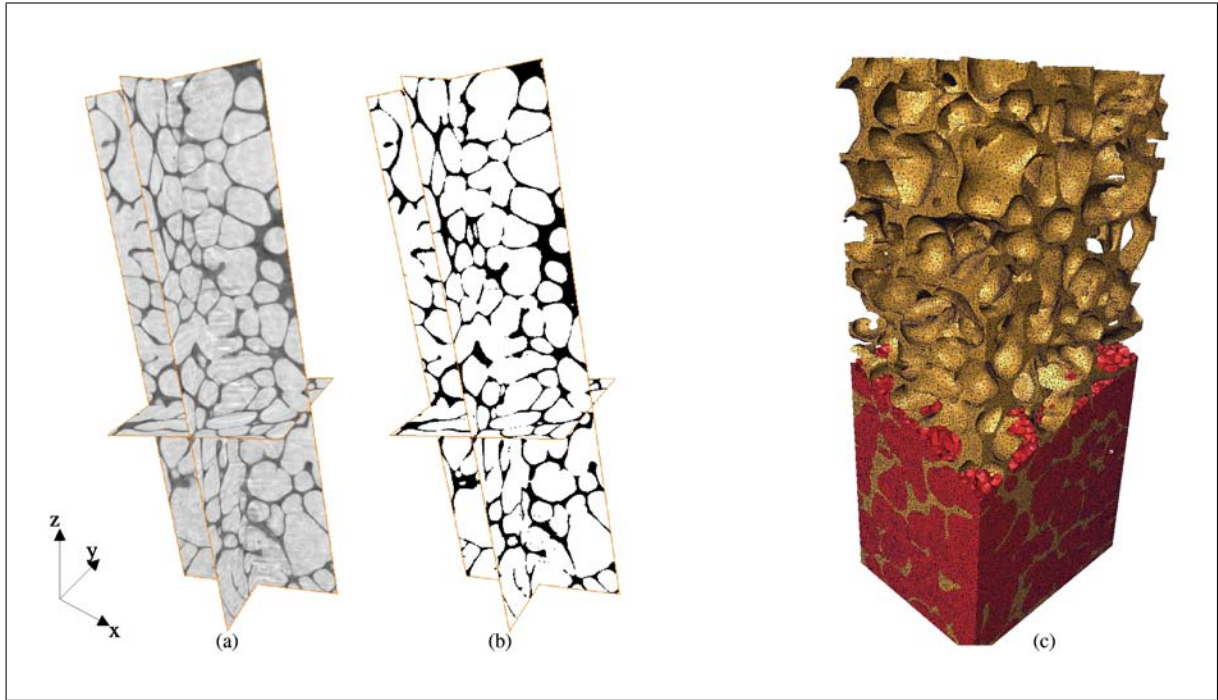


FIG. 3.5 – Microstructure d'un réfractaire électro-fondu zircone-verre caractérisée par microtomographie [Madi, 2006]. Volume représenté : $350 \times 350 \times 700 \mu\text{m}^3$. (a) Segmentation du volume pour séparer les phases en présence. (b) Détection de l'isosurface, et triangulation. (c) Maillage obtenu (éléments tétraédriques linéaires, 1 500 000 degrés de liberté). La zircone est ici en rouge, et la phase vitreuse en jaune.

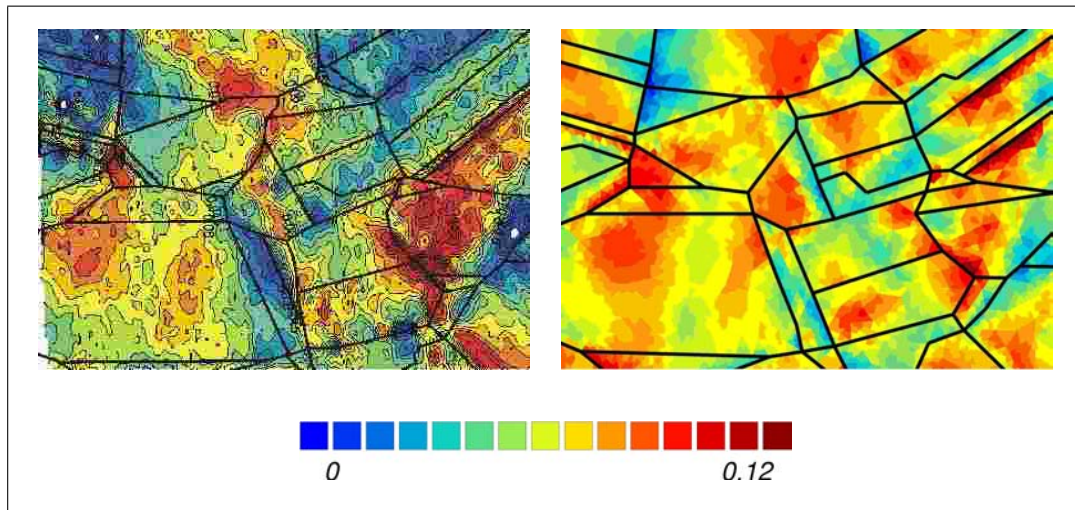


FIG. 3.6 – Champ de déformation axiale sur une surface libre après 5% de déformation macroscopique sur du cuivre OFHC. A gauche : champ expérimental. A droite : champ obtenu par calculs éléments finis, avec une microstructure représentative, un maillage libre fin respectant les joints de grains (130 818 nœuds), et des conditions aux limites de déformation homogènes aux contours [Musienko *et al.*, 2007].

3.2.3 Microstructures synthétiques statistiquement représentatives

Cette démarche peut être située à l’opposé de la précédente en ce sens qu’il ne s’agit pas d’une cartographie de la réalité mais d’une représentation statistique. Ainsi Mathieu [Mathieu, 2006] et Osipov [Osipov, 2007], [Osipov *et al.*, 2008], sur de l’acier 16MND5, effectuent une caractérisation statistique aussi précise que possible du matériau réel (taille et morphologie des grains, orientations morphologique et cristallographique ...), à partir d’une cartographie EBSD expérimentale, et génèrent une microstructure respectant cette définition statistique. La figure 3.7 illustre cette démarche avec une microstructure bainitique développée à partir de polyèdres de Voronoï. Cette démarche pourrait permettre uniquement une confrontation statistique de la localisation de la déformation. Il n’y a pas eu, à notre connaissance, de démarche entreprise dans ce sens.

3.2.4 Microstructures réelle en surface, et synthétique en volume

Cette troisième approche est intermédiaire aux deux précédentes. La microstructure obtenue a une surface semblable à la cartographie EBSD du matériau réel, mais une troisième dimension synthétique construite selon la caractérisation de surface. Deux voies ont été explorées quant à la géométrie de départ utilisée pour la modélisation synthétique : les polyèdres de Voronoï contraints, ou les ellipsoïdes.

La technique des polyèdres de Voronoï contraints consiste à utiliser en surface la cartographie EBSD (après nettoyage), et à générer, selon la troisième dimension, une microstructure synthétique respectant les caractéristiques statistiques. Il s’agit donc d’une approche réelle en surface et synthétique en volume. Cette démarche a notamment été utilisée par Zeghadi [Zeghadi, 2005]. La surface n’était pas une EBSD réelle mais des cellules bidimensionnelles de Voronoï. Cette étude a permis pour une même surface de faire varier la microstructure selon la troisième dimension, et d’en étudier l’impact (voir ci-dessus).

Les ellipsoïdes ont été privilégiés par Héripré [Héripré, 2006], [Saint-Pierre *et al.*, 2008], qui représente une microstructure de type quasi-monophasé γ de TiAl. Ce type de description avait auparavant été développé par [Bilger, 2003] d’une part, et Rollett d’autre part [Brahme *et al.*, 2006], [Saylor *et al.*, 2004]. Une microstructure de surface est tout d’abord générée, à partir d’ellipses, de telle sorte qu’elle approche au mieux la microstructure réelle. Les grains sont ensuite modélisés dans le volume par des ellipsoïdes équivalents. La figure 3.8 indique la démarche suivie.

Plusieurs réalisations de la troisième dimension mettent à nouveau en exergue l’impact de la troisième dimension. Néanmoins il n’y a pas eu de confrontation aux champs expérimentaux.

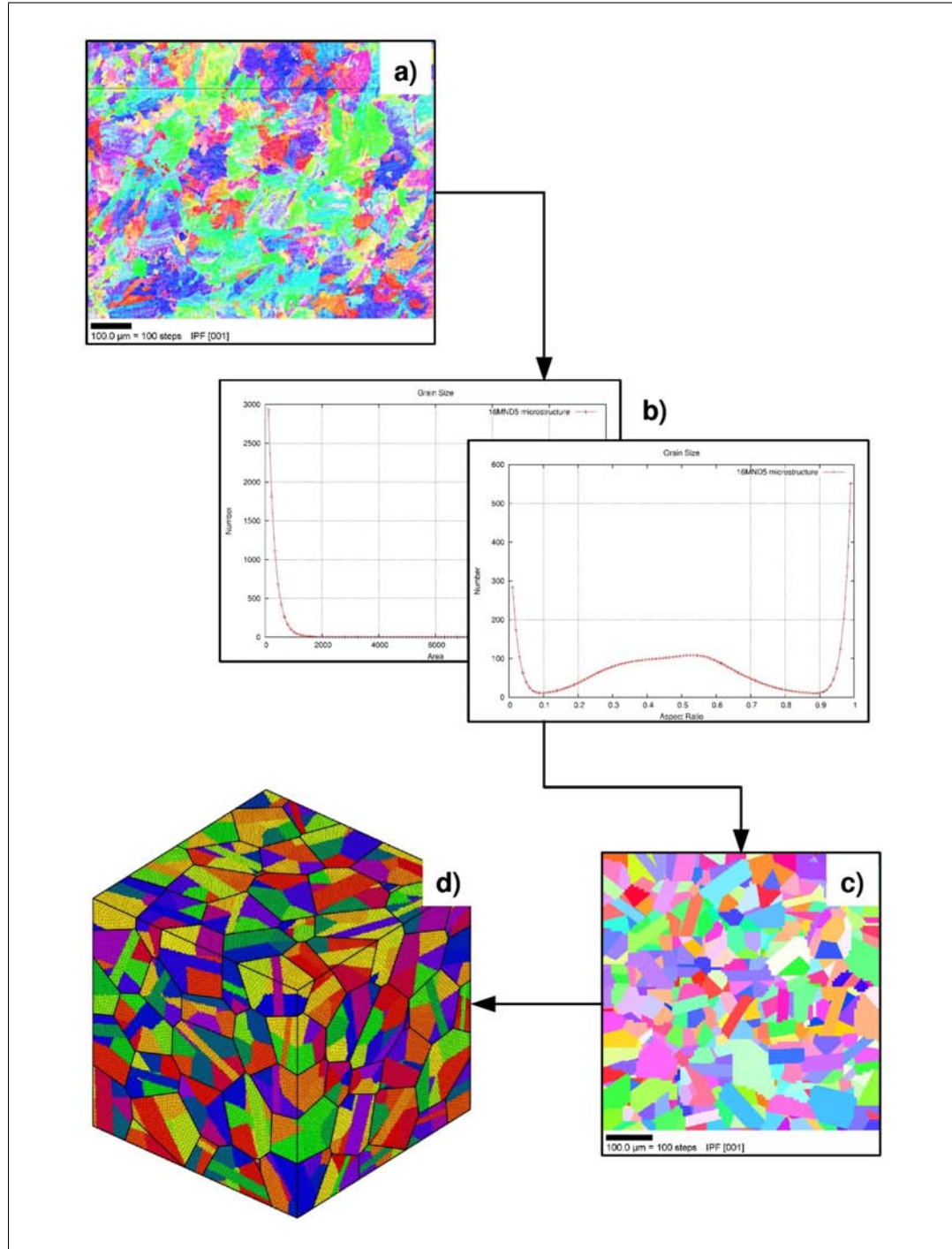


FIG. 3.7 – Un exemple de microstructure générée permettant de décrire de manière réaliste la croissance de la structure bainitique. a) La microstructure réelle est analysée en surface grâce à l'EBSD. b) Des caractéristiques telles que la désorientation, la surface, ou le rapport de forme des grains sont déterminées. c) Une microstructure synthétique, dont la « cartographie EBSD » présente les mêmes caractéristiques que celle de la microstructure réelle, est générée. d) Dans la microstructure finale, la phase austénitique est représentée par des polyèdres de Voronoï, subdivisés afin de rendre compte de la microstructure bainitique. Des macles sont ensuite introduites. [Osipov et Cailletaud, 2006]

3.3 Etude de la localisation de la déformation

3.3.1 Analyse en grandes transformations

A l'échelle du « mésocristal », la déformation n'est pas homogène. Plusieurs études ont montré que les phénomènes à l'échelle mésoscopique affectent significativement la réponse du matériau. [Elsukova et Panin, 1992], [Makarov, 2000] ont montré, par l'expérience et les simulations, en grandes déformations, que la formation des bandes de cisaillement mésoscopiques et la rotation des structures à l'échelle des méso-volumes, phénomènes auxquels ils convient d'ajouter le glissement des joints de grains [Ashby et Verall, 1973] et les mouvements groupés de grains [Astanin *et al.*, 1973], [Muto et Sakai, 2000], jouent un rôle fondamental dans la déformation plastique.

Ainsi, les phénomènes de localisation de la déformation en bandes dans les polycristaux ont le plus souvent été étudiés dans le cadre de l'analyse du comportement en grandes déformations notamment pour des questions de mise en forme ou d'endommagement [Yang et Bacroix, 1996], [Schroeter et McDowell, 2003]...

3.3.2 Faible déformation, apparition de la localisation

Quelques études des années 1990, appliquées notamment aux biphasés, puis au zirconium, [Allais *et al.*, 1994], [Bornert, 1996], ont révélé, en surface, l'apparition de ces bandes de localisation de la déformation, orientées à $\pm 45^\circ$ de la direction de sollicitation, dès le début de la plasticité.

En 2000, Doumalin [Doumalin, 2000], s'appuyant sur les travaux de Bornert [Bornert, 1996], développe la corrélation d'images sous microscope électronique à balayage, et l'applique à l'étude du comportement d'un biphasé Ni/Ag et du zirconium.

Pour le biphasé [Doumalin, 2000], [Doumalin *et al.*, 2000], [Soppa *et al.*, 2001], l'analyse est faite sur une surface représentative de 1 mm^2 , pour des déformations macroscopiques inférieures à 10%, en compression. Les hétérogénéités en bandes observées ont une portée supérieure à la taille moyenne des inclusions et à celle de la surface représentative de la microstructure. L'orientation des bandes est environ à $\pm 45^\circ$ de la direction de compression. La déformation plastique se concentre majoritairement suivant la phase « molle », *i.e.* argent, mais les bandes peuvent ponctuellement traverser la phase dure.

Pour le zirconium, les investigations sont menées sur une zone de $0,5 \text{ mm}^2$, en traction, avec des déformations inférieures à 5 %. Dans le zirconium, ces bandes ont une portée de trois fois la taille de grain, et sont orientées à $\pm 48^\circ$. Par ailleurs, la corrélation avec la microstructure est montrée.

L'ensemble des informations, réunies par Doumalin, le conduisent à rapprocher l'existence de ces bandes, d'un phénomène macroscopique de plasticité isotrope. La cission maximale gouvernerait la formation de bandes infinies à $\pm 45^\circ$. Ces bandes seraient ensuite guidées dans le

matériau par la microstructure. Doumalin relève également que ces bandes apparaissent dès le début de la plasticité. L'observation de trois états de déformation a permis à Doumalin de noter qu'une fois le phénomène installé, le motif d'hétérogénéités de déformation n'évolue plus en fonction du chargement.

Rappelons enfin que ces dernières observations ont été menées sur du zirconium, matériau de structure cristallographique hexagonale, dont le glissement est essentiellement prismatique, sous le chargement étudié. Enfin la microstructure a une faible hétérogénéité de taille et forme de grains, et présente une forte anisotropie (voir [Dexet, 2006] pour des études selon différents chargements faisant intervenir l'anisotropie du zirconium).

Enfin, concernant le cuivre, matériau de notre étude, peu d'éléments sont disponibles actuellement. En 2003, Tatschl et Kolednik [Tatschl et Kolednik, 2003] présentent une étude sur un cuivre OFHC soumis respectivement à 7,4 et 14% de déformation macroscopique sur une zone de $250 \times 200 \mu\text{m}^2$. Cette analyse est couplée à des mesures par EBSD. La très forte hétérogénéité de la déformation, ainsi que les rotations sont étudiées. Il s'agit là de grandes déformations, ce qui ne permet pas l'analyse de l'initiation de la localisation. Par ailleurs, les éventuelles corrélations à grande distance ne peuvent pas être analysées sur la petite zone considérée.

3.3.3 Couplage mesures de champs / calculs éléments finis en vue d'identifier la loi de comportement monocristallin

Plus récemment, Dexet sur un alliage de zirconium [Dexet, 2006] et Héripré sur un alliage TiAl [Héripré, 2006], [Héripré *et al.*, 2007] ont développé une méthode de couplage entre mesure de champs et simulations numériques pour l'identification de lois de comportement.

L'objectif était de s'attaquer au problème des conditions aux limites qu'il convient d'appliquer dans un calcul par éléments finis. Dexet et Héripré, d'après Doumalin et Bornert [Doumalin et Bornert, 2000], proposent d'appliquer le déplacement expérimentalement mesuré (voir figure 3.9), permettant ainsi une description plus réaliste du chargement appliqué. Toutefois, cette démarche pose là encore la question de la troisième dimension. Les champs mesurés sont en effet plan. Dexet et Héripré ont « extrudé » les conditions aux limites planes. L'identification obtenue est bonne, mais il convient de noter que la loi utilisée ne comportait que peu de paramètres à identifier : les interactions entre systèmes de glissement ne sont notamment pas décrites.

3.4 Orientations choisies

Etude de la localisation de la déformation. L'étude expérimentale de la localisation de la déformation a montré une forte dépendance du schéma de localisation à la microstructure (voir l'analyse de Doumalin [Doumalin, 2000] sur biphasé et zirconium). Le matériau étudié dans cette thèse a une microstructure très différente de ceux observés jusqu'à présent. Quel

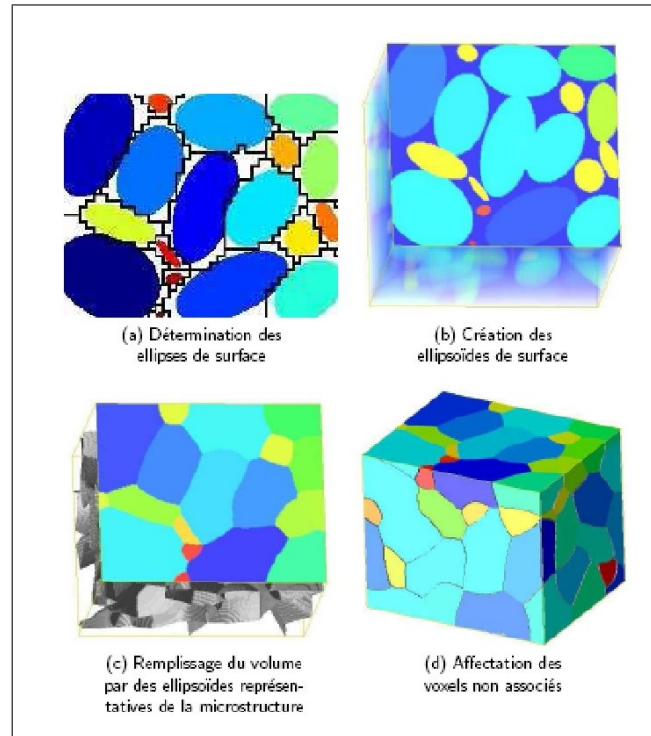


FIG. 3.8 – Génération d’une microstructure de type quasi-monophasé γ de TiAl à partir d’une surface expérimentalement connue [Héripré, 2006].

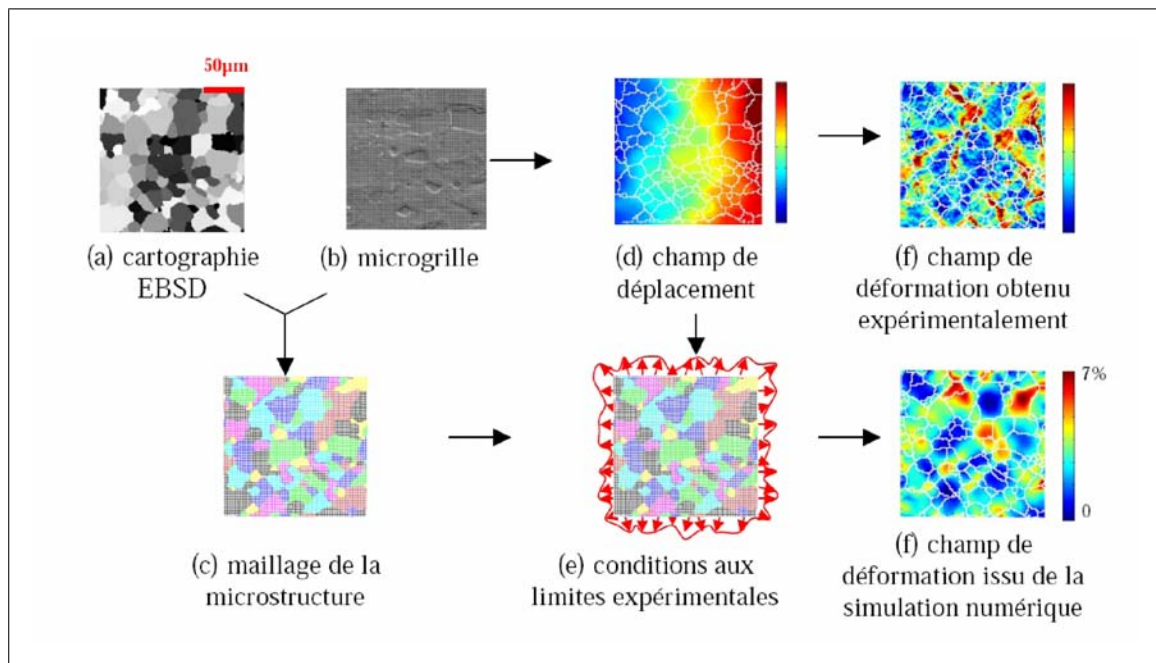


FIG. 3.9 – Obtention des conditions aux limites à partir de mesures de champs de déplacements expérimentaux [Dexet, 2006].

en est donc le schéma de localisation ?

Par ailleurs, les différentes études ([Doumalin, 2000], [Dexet, 2006], [Héripuré, 2006] ...) ont été réalisées sous chargements monotones : traction ou compression. Comment évolue le schéma de localisation sous chargements cycliques ?

Couplage avec les calculs éléments finis. Héripuré [Héripuré, 2006], [Héripuré *et al.*, 2007], a tenté une identification du comportement monocristallin avec un calcul éléments finis dans lequel était imposé, en conditions aux limites, le champ de déplacements 2D issu des mesures de champs expérimentales. Rappelons que la loi de comportement utilisée était largement simplifiée puisqu'elle ne tenait pas compte des interactions entre systèmes de glissement. L'utilisation de conditions aux limites expérimentales pose là encore la question de la troisième dimension. Les mesures de champs effectuées ne permettaient pas de déterminer les composantes hors plan. Cette démarche demanderait à être revisitée avec des mesures de champs tridimensionnelles. Trop d'investigations restent sans doute à mener dans ce domaine, il n'était donc pas envisageable d'aborder ce point dans cette thèse.

Confrontation des champs expérimentaux et simulés. Musienko a indiqué [Musienko *et al.*, 2007] qu'avec un maillage 3D libre suffisamment fin, l'impact du choix des conditions aux limites sur le champ de déformation était grandement amoindri. Par conséquent il est envisageable, de ce point de vue, de confronter champs expérimentaux et calculés. Une seconde question se pose alors : quelle représentation de la microstructure ? La représentation réelle est lourde à mettre en œuvre en l'état actuel des développements expérimentaux. L'approche totalement synthétique ne permet qu'une confrontation statistique. Les microstructures à surface réelle et volume synthétique apparaissent, au jour de la thèse, être un bon compromis. Celles-ci ont actuellement été développées pour des matériaux de microstructure relativement simple : grains de forme convexe, avec une assez faible disparité de taille de grains. Comment décrire un matériau tel que celui utilisé dans cette thèse ? (voir annexe D pour la microstructure).

En conclusion ...

- Les mesures de champs de déformation par corrélation d’images numériques, acquises sous microscope électronique à balayage, ont permis à ce jour de mettre en évidence des structures de localisation à l’échelle des méso-volumes [Doumalin, 2000], [Soppa et al., 2001]. Celles-ci sont constituées de bandes à $\pm 45^\circ$, dont le schéma est en forte corrélation avec la microstructure du matériau. Ces analyses ont été essentiellement conduites sur des biphasés ([Bornert, 1996], [Doumalin, 2000], [Soppa et al., 2001]) ou du zirconium ([Doumalin, 2000], [Dexet, 2006]).
 - Une méthode d’identification par couplage entre mesures de champs et calcul éléments finis a été développée ([Dexet, 2006], [Héripéré, 2006]) dans le but de mieux définir les conditions aux limites des calculs. Le déplacement au contour de la zone d’étude est extrait du champ mesuré expérimentalement, puis appliqué comme conditions aux limites dans le calcul. Cette méthode souffre de ne pas définir la composante hors plan du déplacement et de poser une hypothèse forte sur son évolution sous la surface de l’échantillon. Les résultats obtenus par Héripéré sont bons, mais il est à noter toutefois que la loi de comportement avait été simplifiée (pas de description des interactions entre systèmes de glissement).
 - La confrontation entre champs de déformation mesurés et calculés nécessite le développement d’une microstructure synthétique représentative. Pour les polycristaux, elle peut soit être obtenue par polissage et EBSD successifs [Musienko et al., 2007], soit être totalement synthétique mais statistiquement représentative [Libert, 2007], [Osipov, 2007], (après analyse statistique de la cartographie EBSD), ou encore réelle en surface et statistiquement représentative en volume [Héripéré, 2006].
-

Chapitre 4

Localisation de la déformation

"Success is the ability to go from one failure to another with no loss of enthusiasm."

Sir Winston Churchill

*L*A LOCALISATION de la déformation est ici étudiée à une échelle « mésoscopique », c'est-à-dire intermédiaire entre l'échelle intragranulaire et celle du VER.

Une étude du schéma de localisation de la déformation est conduite, sous chargements non-proportionnels, grâce aux compositions de cisaillement et traction présentées au chapitre 2.

L'évolution, sous chargement cyclique, du schéma de localisation de la déformation est analysée grâce à son suivi par mesures de champs au cours d'un essai de traction-compression¹.

Enfin, la confrontation des champs de déformation expérimentaux et numériques (calculs par éléments finis) est préparée². Une microstructure à surface réelle et volume synthétique est développée afin de reproduire le chargement de traction-compression.

¹Les résultats expérimentaux sous chargement cyclique ici présentés ont fait l'objet d'une première communication dans le cadre du 18^{eme} Congrès Français de Mécanique, Grenoble, août 2007 [Gérard *et al.*, 2007b].

²L'ensemble des analyses sera présenté au 18th International Workshop of Computational Mechanics of Materials, Beijing, octobre 2008 [Gérard *et al.*, 2008c], soumission acceptée.

4.1 Analyse expérimentale du schéma de localisation sous chargements non-proportionnels

4.1.1 Réalisation des essais

La mise en œuvre des essais de cisaillement-traction est décrite au chapitre 2, plus précisément à la page 30. Rappelons simplement que les quatre chargements étudiés sont :

1. une traction simple dans l'axe de laminage de la tôle,
2. une traction selon un axe à 45° de la direction de laminage,
3. un pré-cisaillement suivi, après retour à contrainte macroscopique nulle, d'une traction, tous deux dans l'axe de laminage,
4. un pré-cisaillement dans l'axe de laminage, suivi d'une traction à 45° de ce dernier.

La déformation macroscopique lors de l'étape de cisaillement est de $\epsilon_{12} = 1,4\%$. Les essais sont menés au LPMTM (voir le chapitre 2 pour les détails).

Les tractions sont effectuées sous MEB à l'aide de la machine *in situ* du LMS (décrite au chapitre 2). Les essais sont réalisés en déplacement imposé grâce à un extensomètre à couteaux, placé dans la zone utile, et dont la base de mesure est de 14 mm.

4.1.2 Cartographie EBSD

Il est nécessaire de réaliser une cartographie EBSD et la mesure de champs de déformation sur la même zone pour pouvoir les superposer. Pour cela, un protocole proche de celui décrit dans [Dexet, 2006] est utilisé. Dans un premier temps, quatre plots d'or sont déposés à la surface de l'éprouvette, généralement en son centre. L'espacement entre les plots est défini en fonction du grandissement, de telle sorte qu'ils apparaissent tous les quatre sur les images, tout en étant en limite de zone pour ne pas gêner l'analyse.

La cartographie EBSD est ensuite effectuée sur la zone ainsi définie. Les détails de procédure pour l'EBSD sont présentés en annexe D. Indiquons simplement ici que la tension d'accélération du faisceau du MEB a été réglée à 20 kV ; la taille de spot est comprise entre 5 et 6 (unité arbitraire spécifique au MEB FEI utilisé), la distance de travail est de 25 mm, et l'angle d'inclinaison de 70° . Un pointé est réalisé tous les micromètres. Les cartographies obtenues sur les quatre éprouvettes montrent une microstructure fortement maclée, avec une assez grande dispersion de tailles de grains.

4.1.3 Mesures de champs par corrélation d'images numériques acquises sous MEB

Une microgrille d'or, d'une surface de $500 \times 500 \mu\text{m}^2$, est déposée à la surface de l'échantillon, au centre de la zone utile, par microélectrolithographie (la procédure est présentée au chapitre 3). Le pas de la grille est de $4 \mu\text{m}$. Compte tenu de la forte dispersion de tailles de grains, il n'y a pas toujours plusieurs points de mesure par grain. Il n'est donc pas possible d'envisager une analyse intragranulaire. Pour autant, le but ici est d'observer le schéma de localisation « mésoscopique ». Il a donc été considéré suffisamment fin. De plus, ce pas nous assure une bonne qualité des grilles, lesquelles sont d'autant plus difficiles à obtenir que le pas est faible. Le schéma d'intégration choisi (voir figure 4.2) est associé à une base de mesure de $8 \mu\text{m}$.

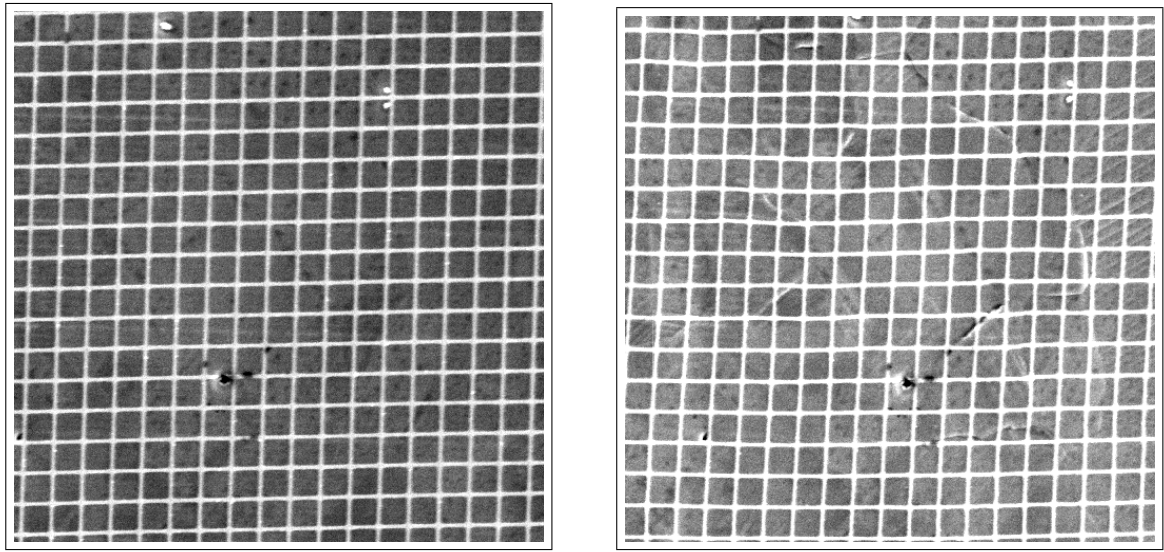


FIG. 4.1 – Microgrille d'or déposée par microélectrolithographie à la surface de l'échantillon, et servant de marquage pour la corrélation d'images sous MEB. Le pas de la grille est de $4 \mu\text{m}$. A gauche : grille avant essai. A droite : grille après 4 % de déformation en traction (photo prise en charge).

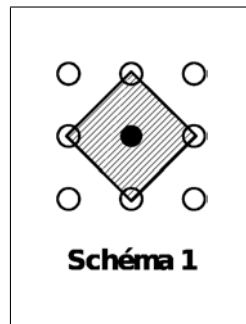


FIG. 4.2 – Schéma d'intégration utilisé pour le calcul des déformations.

4.1.4 Résultats et analyse

Les quatre champs de déformation obtenus sont présentés aux figures 4.5 et 4.6. Une première analyse visuelle qualitative fait apparaître, pour l'ensemble des chargements, un schéma de localisation complexe. En effet, plusieurs échelles de localisation se superposent. En simplifiant la description, il est possible d'en considérer au moins trois. Une première échelle très fine est composée de bandes courtes fortement déformées. Une seconde échelle comprend des bandes un peu plus longues, et fines, formant un réseau de localisation à $\pm 45^\circ$ environ. Enfin, de larges zones non déformées apparaissent, zones pour lesquelles le champ de mesure est trop petit pour permettre une analyse des corrélations à grande distance. La figure 4.3 schématise ces différents types de bandes. Le champ est issu de l'essai cisaillement puis traction à 0° .

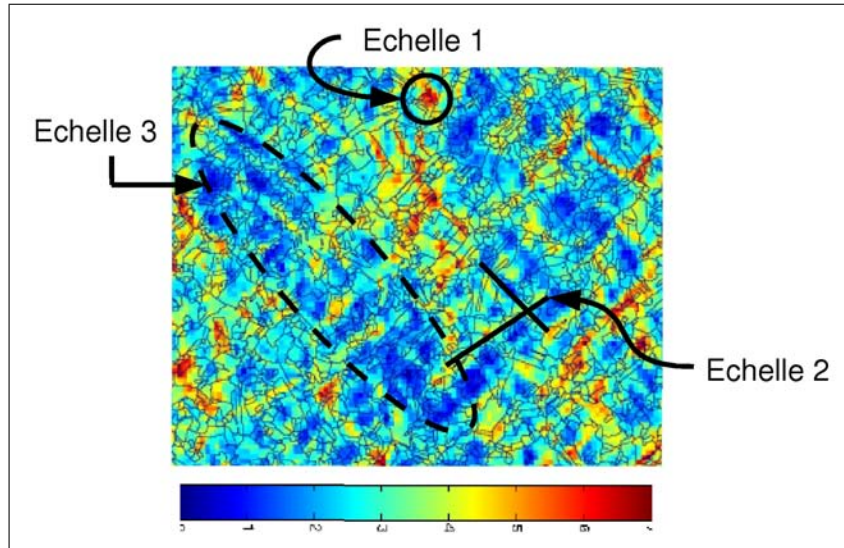


FIG. 4.3 – Le schéma de localisation obtenu à l'issue des mesures de champs est complexe. En simplifiant la description, il est possible d'y considérer au moins trois échelles. Champ ici obtenu lors de la phase de traction du chargement « cisaillement puis traction à 0° ».

Afin de tenter de mieux comprendre ce schéma de localisation, une analyse quantitative des données spatiales est effectuée. La méthode utilisée est celle de la covariance à deux points détaillée par Doumalin dans [Doumalin *et al.*, 2003]. Elle vise à fournir une caractérisation statistique de la répartition spatiale des déformations à partir de l'analyse du champ dans une section plane représentative. Son principe repose sur la quantification statistique, via une fonction de corrélation $C(\mathbf{h})$, de l'écart entre les valeurs de déformation pour deux points distants de \mathbf{h} . A partir d'une image en niveaux de gris de la carte de déformations équivalentes³ acquise par microextensométrie, un covariogramme est obtenu par une procédure de calcul de

³Déformation équivalente au sens de von Mises, calculée sous l'hypothèse que la transformation locale est axisymétrique, la troisième direction principale de déformation étant supposée normale au plan d'observation. Le résultat s'apparente au second invariant plan de la déformation, et vaut $\epsilon_{eq} = 2/3|\epsilon_2 - \epsilon_1|$ où les ϵ_i sont les déformations principales dans le plan d'observation.

la fonction de corrélation basée sur l'utilisation de la transformée de Fourier à deux dimensions. Au centre de l'image du covariogramme, un motif caractéristique apparaît à partir des niveaux de gris les plus clairs. Il correspond aux valeurs les plus élevées de $C(\mathbf{h})$, et caractérise statistiquement la façon dont la déformation se répartit dans le matériau. La géométrie de ce motif permet alors de déterminer les caractéristiques géométriques de ces bandes de localisation de la déformation, leur longueur moyenne, leur épaisseur (si la résolution spatiale est suffisante), et leur direction par rapport à l'axe horizontal. Ces caractéristiques permettent d'analyser la portée du phénomène de localisation, et de le relier aux dimensions caractéristiques de la microstructure.

Pour comparer les résultats de microextensométrie des différents chargements, nous avons utilisé la déformation équivalente de von Mises déterminée à l'aide du logiciel *CorrelManuV*. Les covariogrammes correspondants sont également tracés. Il s'avère alors que les covariogrammes ne font pas ici apparaître un motif aussi net que ceux obtenus dans les études antérieures sur le zirconium ou les biphasés Fe/Ag ou Ag/Ni, et ne permettent pas d'analyse quantitative du schéma de localisation. Le motif en croix central apparaît bien, mais il est difficile de quantifier son extension spatiale. Les bandes légèrement blanches verticales qui apparaissent sur le premier covariogramme correspondent au défaut périodique d'acquisition de l'image MEB. Le tracé des profils des covariogrammes a néanmoins été fait selon 0° , 45° et 90° par rapport à l'horizontale (voir figure 4.7). Leur exploitation est rendue difficile par la présence des oscillations périodiques induites par le défaut d'image. De plus, les asymptotes ne sont pas atteintes, conséquence probable de la non représentativité des champs analysés par rapport aux grandes échelles.

Rappelons que les cartographies EBSD ont été réalisées sur les mêmes zones que les mesures de champs. La figure 4.4 présente la superposition des joints de grains, issus de la cartographie EBSD, et le champ de déformation équivalente de von Mises. La même superposition avait été réalisée par Doumalin sur du zirconium [Doumalin, 2000]. Les images obtenues, respectivement pour le cuivre et le zirconium, sont mises en regard sur la figure 4.4. Il apparaît clairement que la microstructure de morphologie beaucoup plus simple (grains convexes, moindre hétérogénéité de taille, absence de macles) du zirconium et son comportement différent sont associés à un schéma de localisation lui aussi nettement plus lisible.

Pour établir de façon certaine et détaillée le rapport entre morphologie de la microstructure et schéma de localisation de la déformation, des analyses complémentaires devront être menées. Plusieurs difficultés ont ici été rencontrées lors de l'acquisition des images (défaillance informatique lors de l'acquisition notamment), ce qui a rendu l'analyse plus complexe.

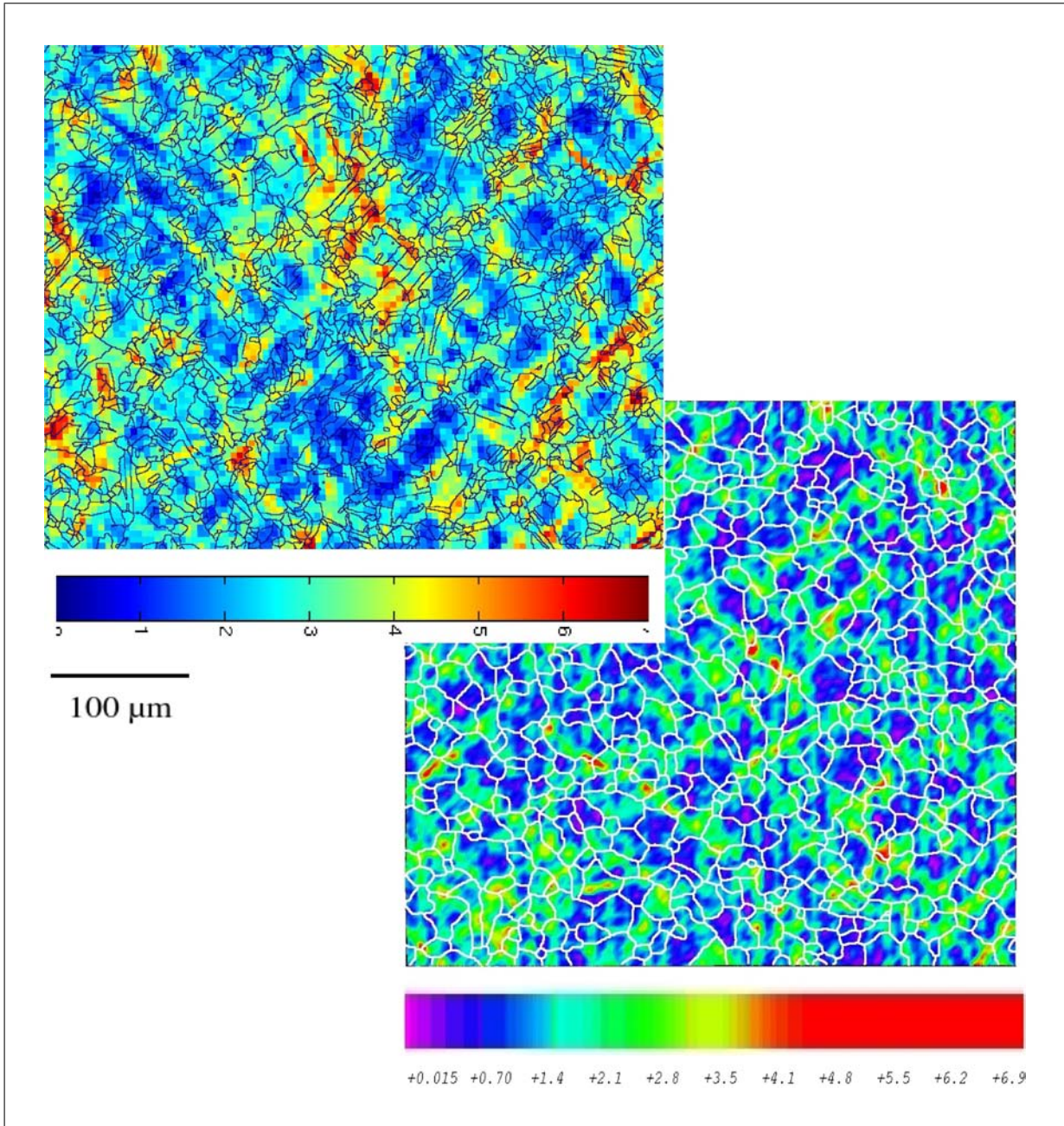


FIG. 4.4 – Superposition de la morphologie de la microstructure (joints de grains extraits de la cartographie EBSD) et du champ de déformation de von Mises. A gauche, cuivre OFHC de notre étude (chargement « cisaillement puis traction à 0° »). A droite, alliage de zirconium étudié par Doumalin [Doumalin, 2000].

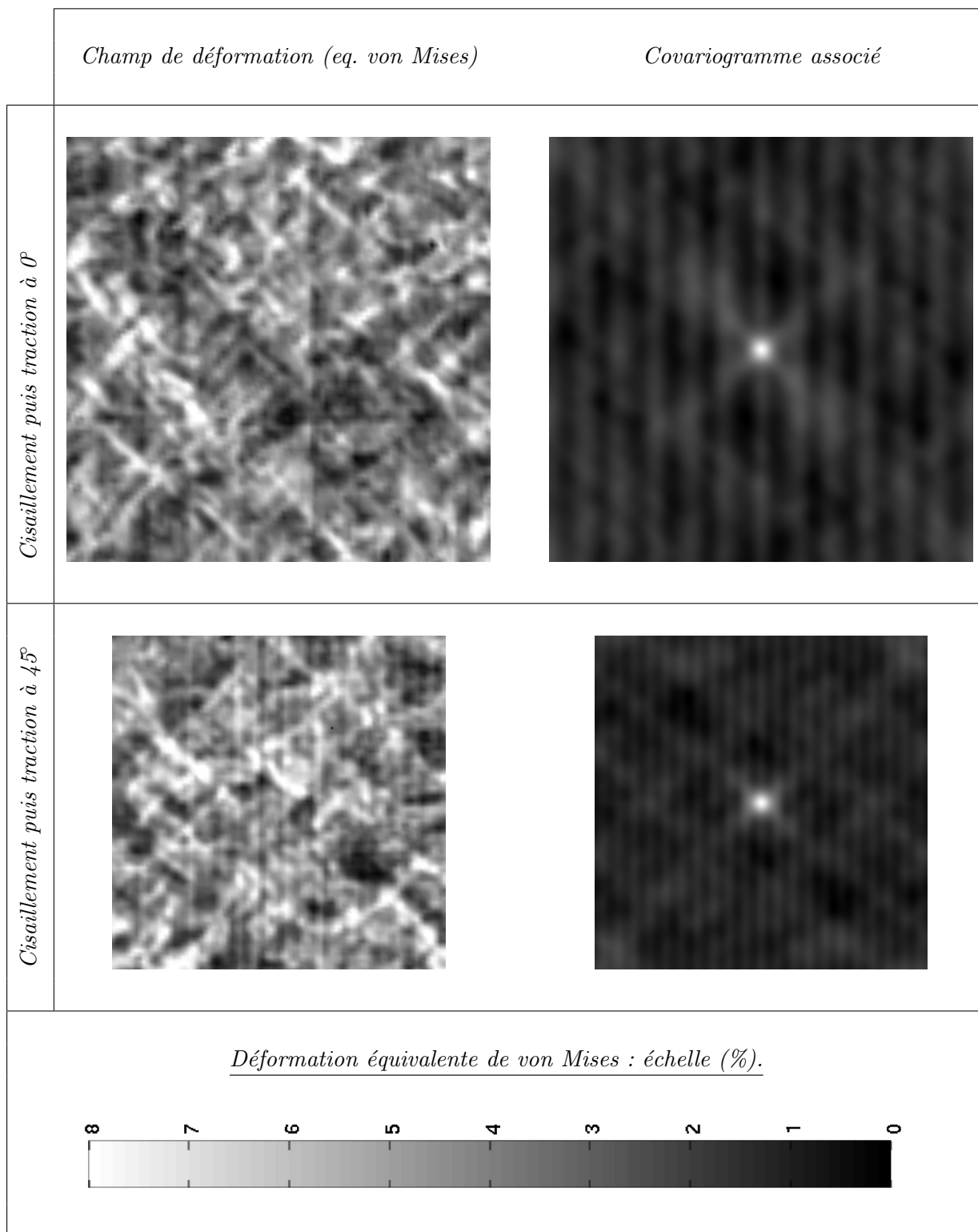


FIG. 4.5 – Champs de déformation équivalente de von Mises, et covariogramme associé.

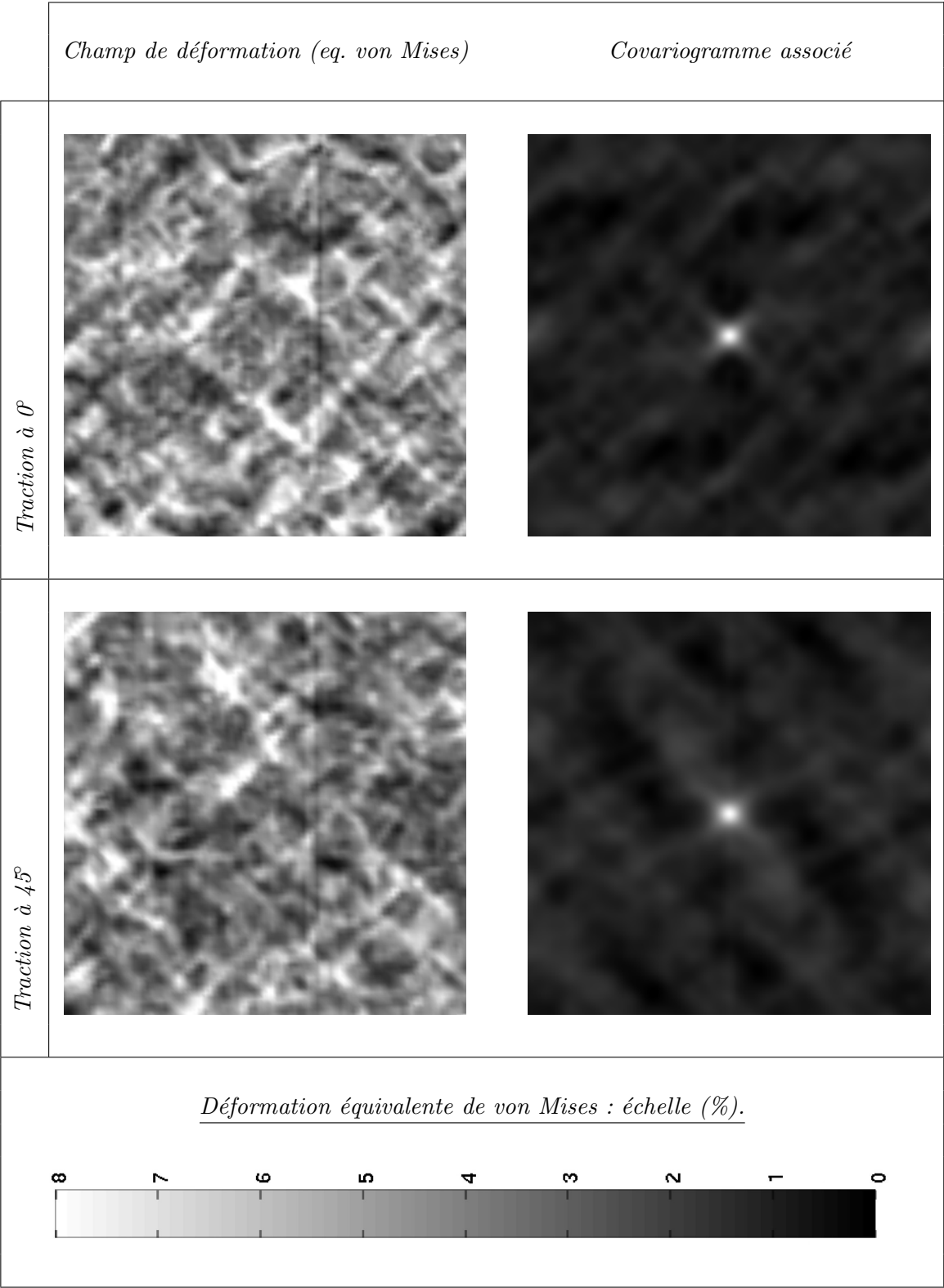


FIG. 4.6 – Champs de déformation équivalente de von Mises, et covariogramme associé.

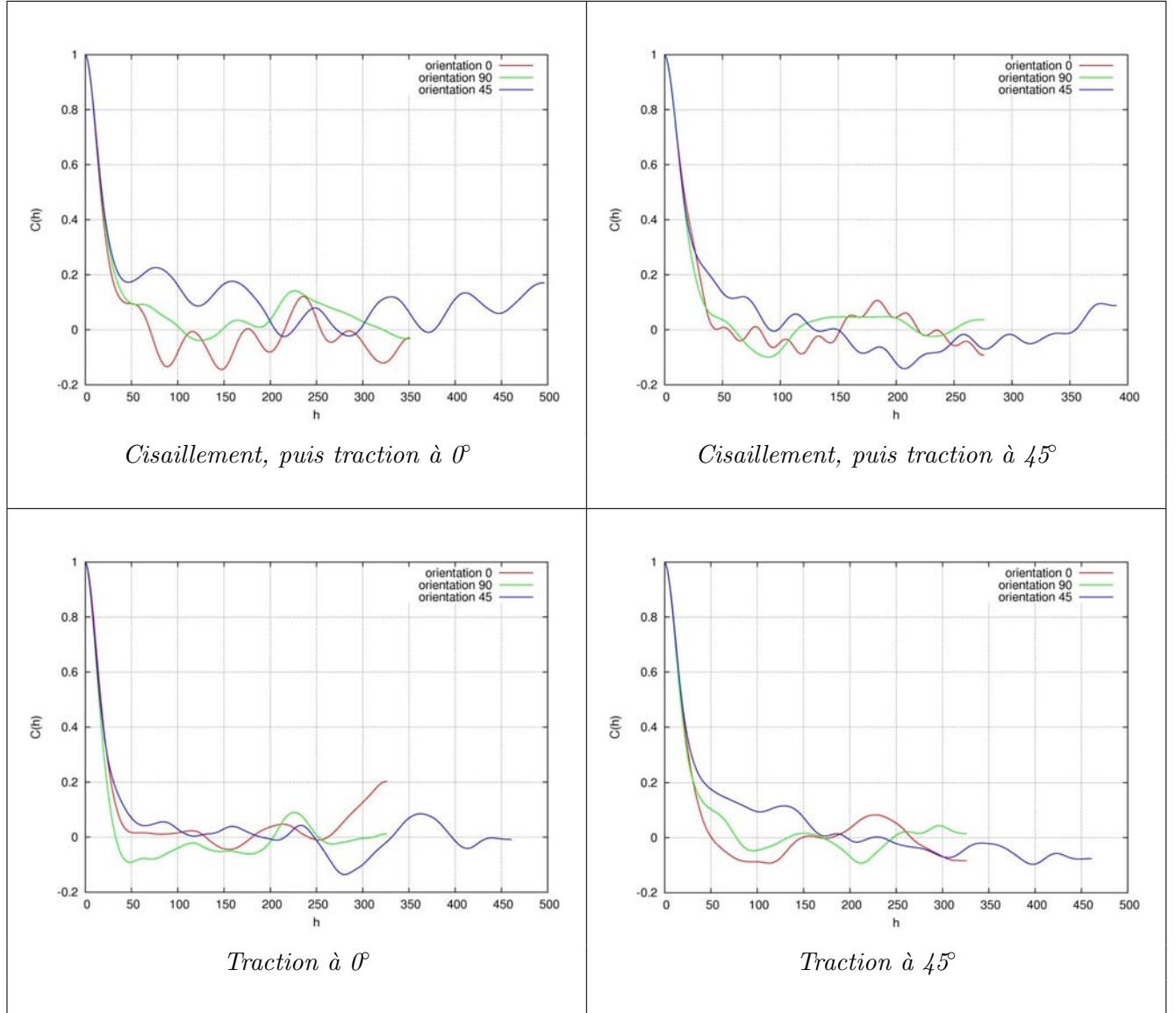


FIG. 4.7 – Profils caractéristiques des covariogrammes pour les différents chargements. L'échelle spatiale est ici arbitraire. Il est possible de l'exprimer selon les dimensions de la zone analysée, ceci n'a pas été fait compte tenu de la difficulté de lecture des diagrammes.

4.2 Etude expérimentale de l'évolution du schéma de localisation sous chargements cycliques

4.2.1 Réalisation des essais

Les essais *in situ* sous chargements cycliques sont effectués à l'aide d'une machine de traction / compression / torsion d'une capacité de 10 *kN* en traction / compression et 50 *N.m* en couple. Elle peut accueillir plusieurs géométries d'éprouvettes comme les éprouvettes CT et CTS, mais aussi des éprouvettes cylindriques.

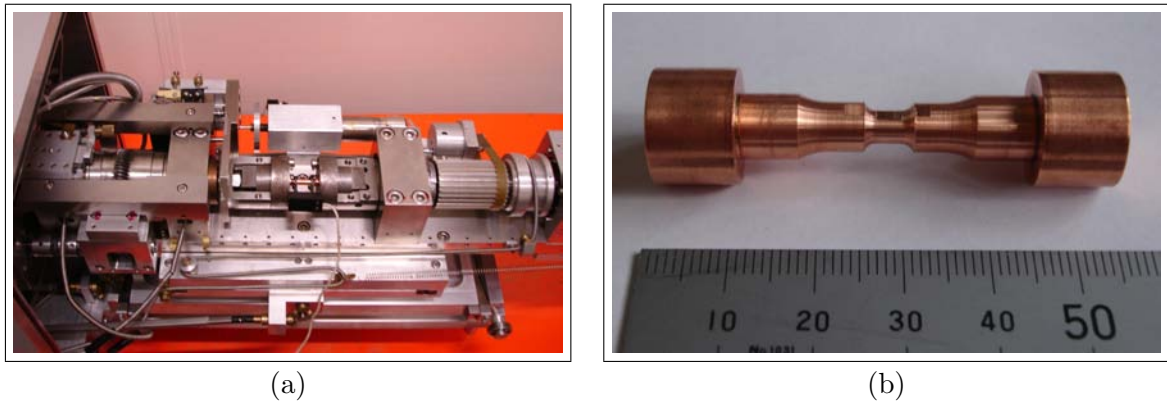


FIG. 4.8 – (a) Photo de la machine de traction / compression / torsion *in situ* du LMS. (b) Géométrie de l'éprouvette de traction / compression prélevée dans une tôle de cuivre OFHC, laminée à chaud, de 14 *mm* d'épaisseur.

4.2.2 Mesures de champs par corrélation d'images numériques acquises sous MEB

Une cartographie EBSD est également effectuée sur la zone de mesures de champs. Elle permettra, lors de la partie suivante, de générer la microstructure correspondante en vue de calculs par éléments finis.

La micro-grille nécessaire à la corrélation d'images est ensuite déposée par microélectrolithographie (voir chapitre 3 pour plus de détails). Le pas de la grille est choisi ici égal à 2 μm afin d'accéder à une vision un peu plus locale. Le schéma d'intégration utilisé pour le calcul des déformations est le même (voir figure 4.2).

4.2.3 Difficultés rencontrées

La réalisation de cet essai a soulevé beaucoup de difficultés. Tout d'abord la géométrie de l'éprouvette a dû être modifiée : le montage *in situ* imposait une longueur trop grande relativement au diamètre, compte-tenu de la présence d'une étape de compression dans le chargement. En conséquence, les éprouvettes flambaient. La géométrie a donc été modifiée : une zone utile plus réduite a été introduite (voir figure 4.8).

Par ailleurs, suite aux soucis d'acquisition lors des premiers essais, le système d'acquisition des images a été changé pour un second dont les caractéristiques étaient moins bien connues. Plusieurs aberrations d'acquisition sont apparues dans le premier cycle de chargement, puis des problèmes de balayage très importants (sauts de ligne) rendant quasi-impossible la mesure des déformations selon l'axe y des images.

De plus, le pilotage de l'essai n'est pas automatisé. Il s'agit d'inverser le chargement (passage de traction à compression et inversement) manuellement.

Par ailleurs, et surtout, il convient de noter que le chargement s'effectue dans une amplitude de $\pm 2\%$ de déformation globale. Or, les différentes analyses des incertitudes, liées à l'utilisation du MEB pour la corrélation d'images, ont placé la limite de mesure à 1% de déformation globale. L'ensemble des acquisitions a été réalisé presque en limite de précision. Les résultats obtenus seront essentiellement analysés qualitativement.

Pour limiter les problèmes liés à la dérive du faisceau, d'une part, aux variations de grandissement, d'autre part, l'essai a dû être réalisé en continu, et le nombre d'images acquises minimisé.

4.2.4 Définition du chargement

Le chargement imposé est un cyclage traction-compression, imposé en déplacement. La valeur moyenne de la déformation est de -2% . Un premier cycle permet la mise en place du chargement. 10 cycles sont ensuite effectués. La déformation macroscopique globale est alors comprise entre -4% et -2% . La figure 4.9 schématise le chargement imposé.

La déformation axiale est mesurée par un extensomètre placé de part et d'autre de la zone utile, avec une base de mesure de 14 mm, la déformation étant ramenée à la zone utile, en supposant que cette dernière fait 3 mm. Ceci conduit à une amplitude de déplacement imposé de $\pm 60\mu$, soit une déformation $\pm 0,428\%$ enregistrée par l'extensomètre.

4.2.5 Résultats et analyse

Au cours de chaque cycle, cinq images sont acquises : à -4% , -2% (*i.e* déformation moyenne), 0 et -2% . Le premier cycle n'a pas pu être analysé car trop bruité. Les corrélations des images suivantes sont donc effectuées par rapport à la quatrième prise de vue, qui correspond à une déformation globale de -4% . Pour limiter la contamination au carbone liée à

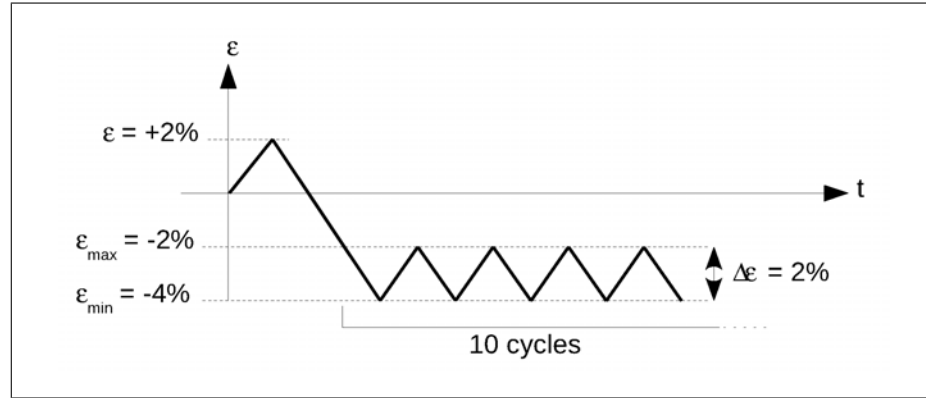


FIG. 4.9 – Représentation schématique de la consigne du chargement cyclique imposé.

la durée d'irradiation de l'échantillon, les acquisitions d'images n'ont été effectuées que pour les cycles 2, 3, 4, 6 et 11.

Déformation macroscopique. Compte tenu de la dimension de la zone utile, il n'était pas possible de placer l'extensomètre à couteaux directement sur la zone utile plus réduite. La déformation macroscopique est obtenue par moyenne sur le champ de déformation, lui-même provenant des mesures de déplacements par corrélation d'images. Ceci pré-suppose que la zone observée est suffisamment grande pour être représentative.

L'évolution au cours du chargement des quatre composantes planes du gradient du déplacement $\frac{\partial u_i}{\partial X_j}$ est présentée sur la figure 4.10. Les composantes hors diagonale sont quasi-nulles, la traction a donc bien été réalisée dans les axes. La courbe se rapportant à la composante axiale est très chaotique. Ceci est dû à la dérive du faisceau du microscope, et aux « sauts de ligne » aléatoires, et donc à l'erreur de mesure qui s'ensuit. En effet, compte tenu de la résolution demandée, le microscope met environ 0,3 s pour balayer le champ dans la direction transverse, mais 20 minutes pour balayer l'ensemble de l'image et donc donner la composante axiale. La dérive est négligeable sur 1 ligne, ou un ensemble de lignes utiles pour l'analyse par corrélation, mais pas sur 20 minutes. En conséquence, les champs ne seront pas analysés selon la composante axiale car trop entachée d'erreur. *A contrario*, la composante transverse est beaucoup plus régulière et pourra ainsi être considérée fiable, dans la limite des incertitudes évoquées précédemment (notamment les éventuelles variations de grandissement). Les champs correspondants sont présentés aux figures 4.12, 4.13, 4.14, 4.15, et 4.16.

La figure 4.11 permet de mieux analyser la composante transverse. Une dérive apparaît très nettement. Un incrément de déformation moyenne vient s'ajouter à chaque cycle. Le montage des images de champs de déformation, obtenues à chaque séquence de chargement, sous forme de film montre clairement qu'il n'y a pas, ici, de dérive de la mesure. En effet, le niveau de déformation des zones peu déformées reste quasiment constant, proche de zéro, alors que celui des zones très sollicitées augmente, l'hétérogénéité globale s'amplifiant. En conséquence, l'évolution observée de la déformation transverse correspond à un phénomène de rochet local. Pour mémoire, le phénomène macroscopique de rochet désigne l'incrément de déformation qui vient s'ajouter à la déformation macroscopique à chaque cycle d'un chargement imposé

en contrainte. Ici, le chargement macroscopique est imposé en « déformation » (déplacement piloté par l'extensomètre qui inclut la zone utile, les congés, et une partie de l'échantillon de diamètre plus important). Le rochet observé est lui local. Il pourrait être attribué aux contraintes internes ou à une localisation macroscopique de la déformation dans l'échantillon.

Champ de déformation mésoscopique. Les figures 4.12, 4.13, 4.14, 4.15, et 4.16, présentent les champs de déformation transverse pour les cycles étudiés. Les images sont disposées selon le stade du cycle observé, en accord avec le schéma indicatif. La composante transverse étant observée, les zones fortement déformées apparaissent en bleu.

Plusieurs éléments qualitatifs se dégagent.

1. Il apparaît tout d'abord que le schéma de localisation est déjà en place dès le second cycle. Il restera le même tout au long du chargement. Aucune bande de localisation n'apparaît ou disparaît par la suite.
2. Au sein d'un même cycle, les bandes de localisation apparaissent, se renforcent jusqu'à la sollicitation maximale, pour diminuer ensuite, jusqu'à quasi disparaître.
3. D'un cycle à l'autre les bandes réapparaissent au même endroit.
4. Le niveau de déformation maximal atteint au sein d'une bande tend à augmenter au fur et mesure des cycles et les bandes semblent s'élargir légèrement. Le phénomène d'intensification paraît plus marqué que celui de l'élargissement.
5. Les zones non déformées le restent tout au long du chargement ; aucune tendance à l'uniformisation de la déformation n'est notée.

L'intensification locale de la déformation va dans le sens des observations à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire celui d'un incrément de déformation à chaque cycle.

Observation locale Etant donné le pas de la grille ($2\ \mu\text{m}$), et la taille de grains un peu plus grande que sur le cuivre précédemment étudié, il a été possible d'effectuer quelques observations locales de la déformation. Deux zones (voir figure 4.17) sont présentées ici. La figure 4.18 présente deux cas différents de localisation de la déformation. Le champ de déformation est superposé sous forme de traits de couleur à l'image de la microgrille, ce qui permet de voir la microstructure du matériau au travers de la grille. L'orientation des traits de couleur indique les directions principales de déformation, et la couleur l'intensité du déviateur local (*i.e.* la déformation équivalente de von Mises définie précédemment).

Ces deux images ont été prises au cours du même cycle, à 0% de déformation.

Sur l'image de gauche, il apparaît que la bande de localisation de la déformation suit les lignes de glissement intragranulaire. Sur l'image de droite, la localisation s'effectue, au contraire, suivant les joints de grains. Il est à noter sur cette image de droite, que les grains limitrophes ont néanmoins des lignes de glissement bien visibles.

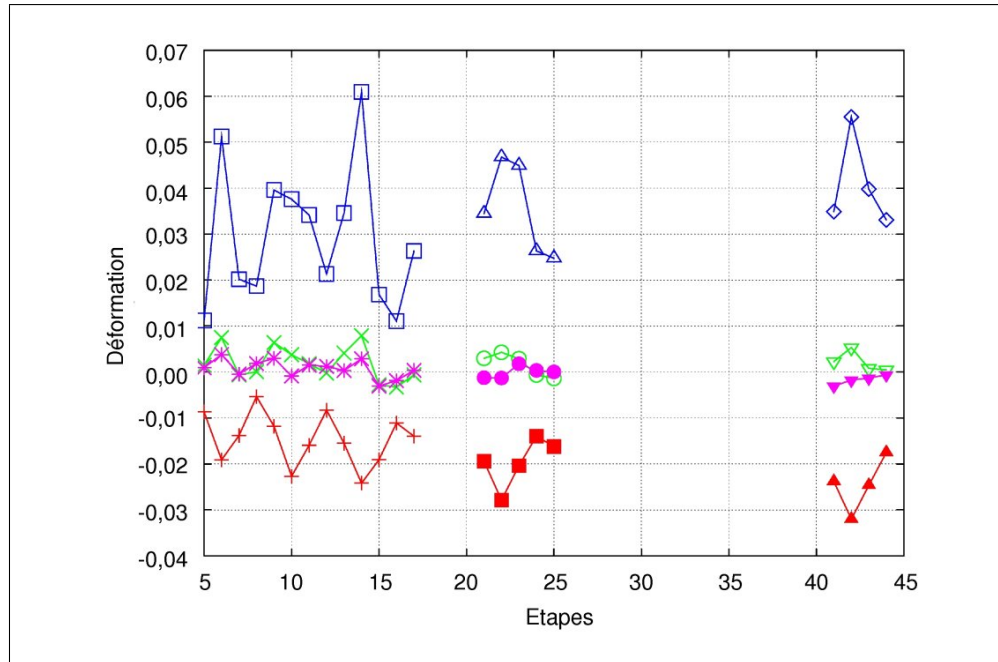


FIG. 4.10 – Gradient du déplacement moyen sur la zone analysée, déduit du champ de déplacement mesuré par corrélation d'images. En bleu, la composante axiale, en rose et vert, les composantes hors diagonale, en rouge, la composante transverse.

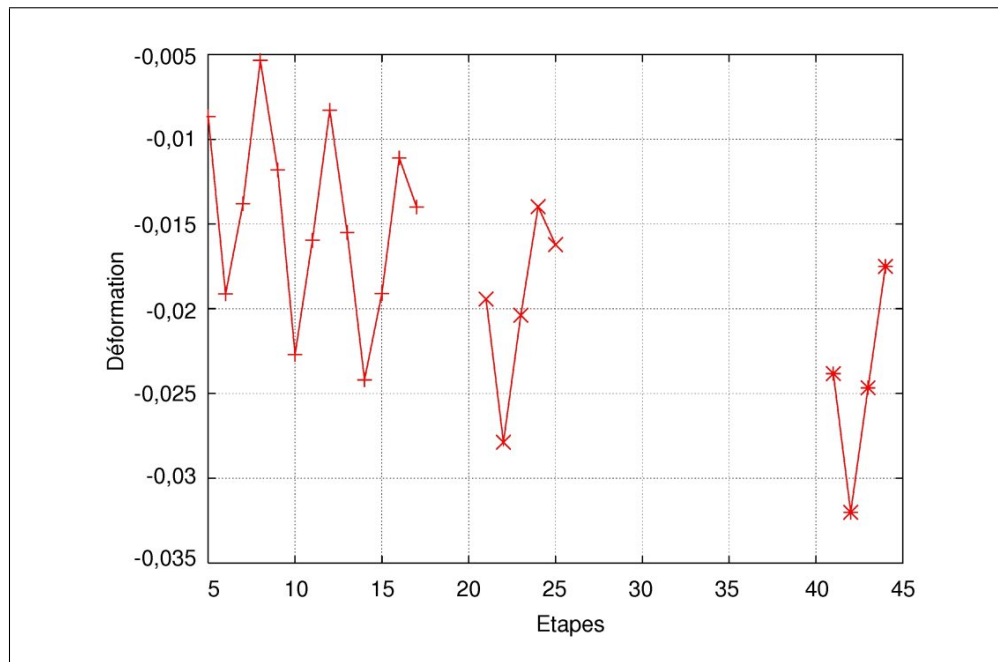


FIG. 4.11 – Gradient du déplacement moyen sur la zone analysée, déduit du champ de déplacement mesuré par corrélation d'images. « Zoom » sur la composante transverse $F_{XX} - 1$.

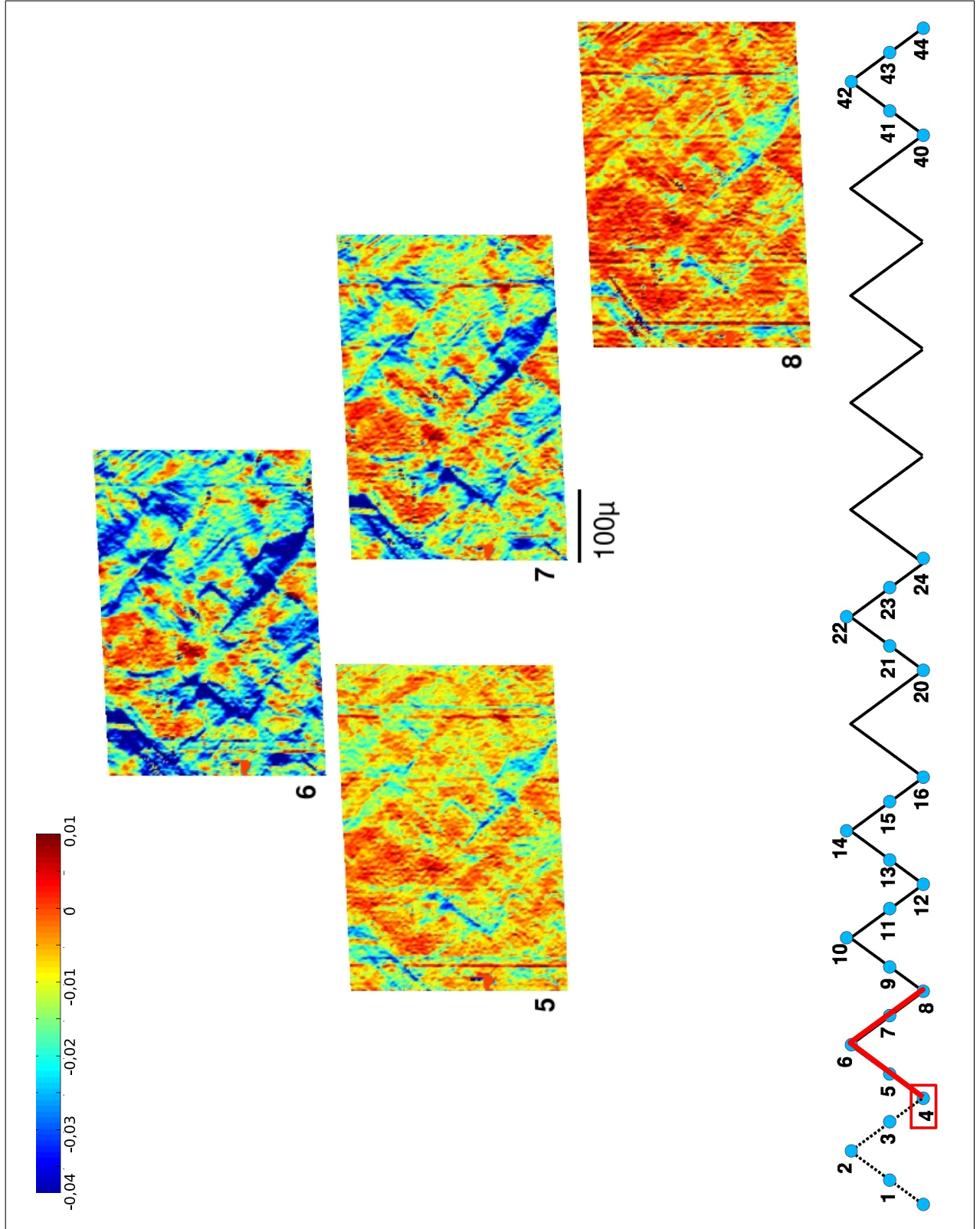


FIG. 4.12 – Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images *in situ* en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta \epsilon_{22} = 2\%$). Surface observée : 280 μm x 440 μm. Cycle 2.

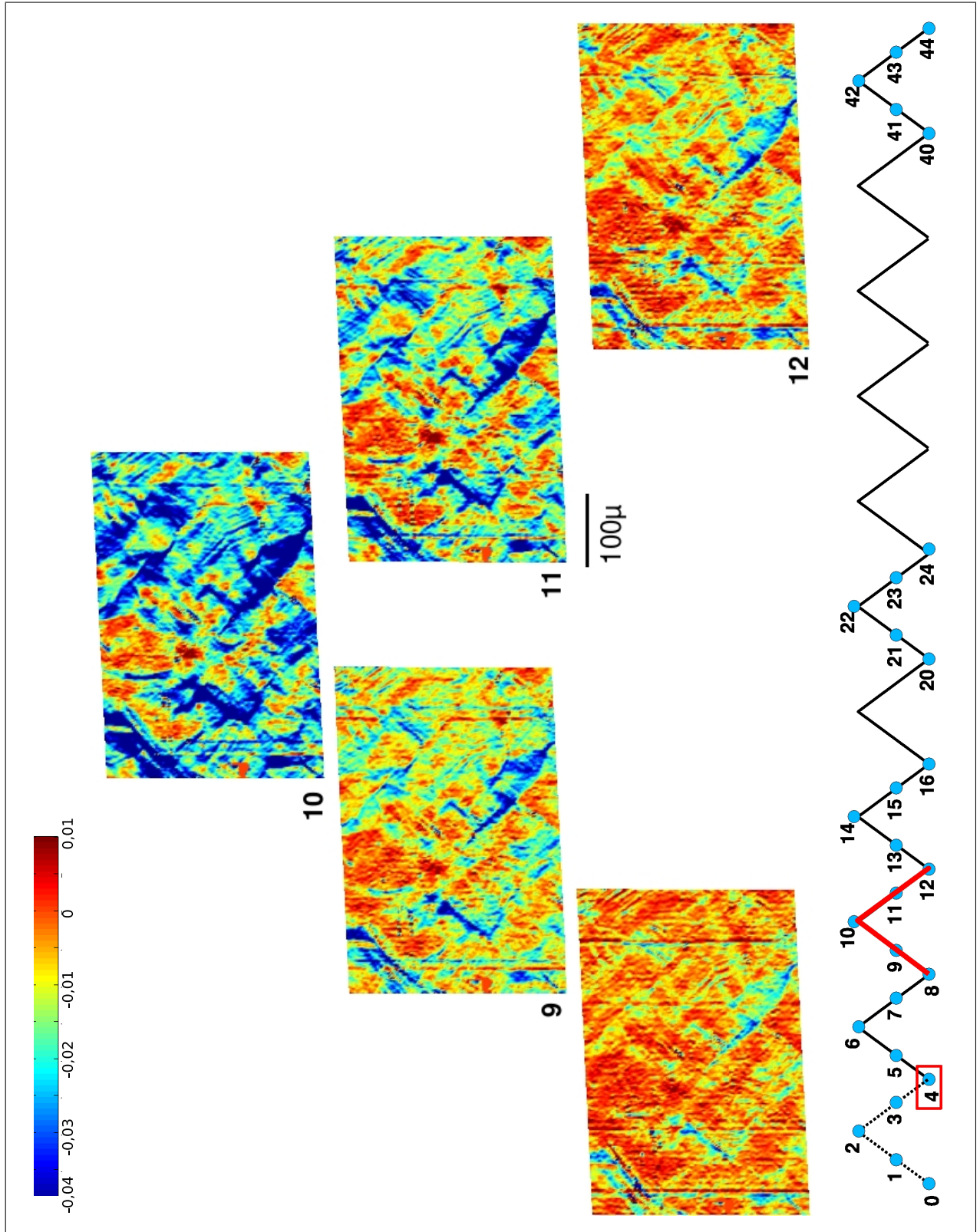


FIG. 4.13 – Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images *in situ* en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta \epsilon_{22} = 2\%$). $280 \mu\text{m} \times 440 \mu\text{m}$. Cycle 3.

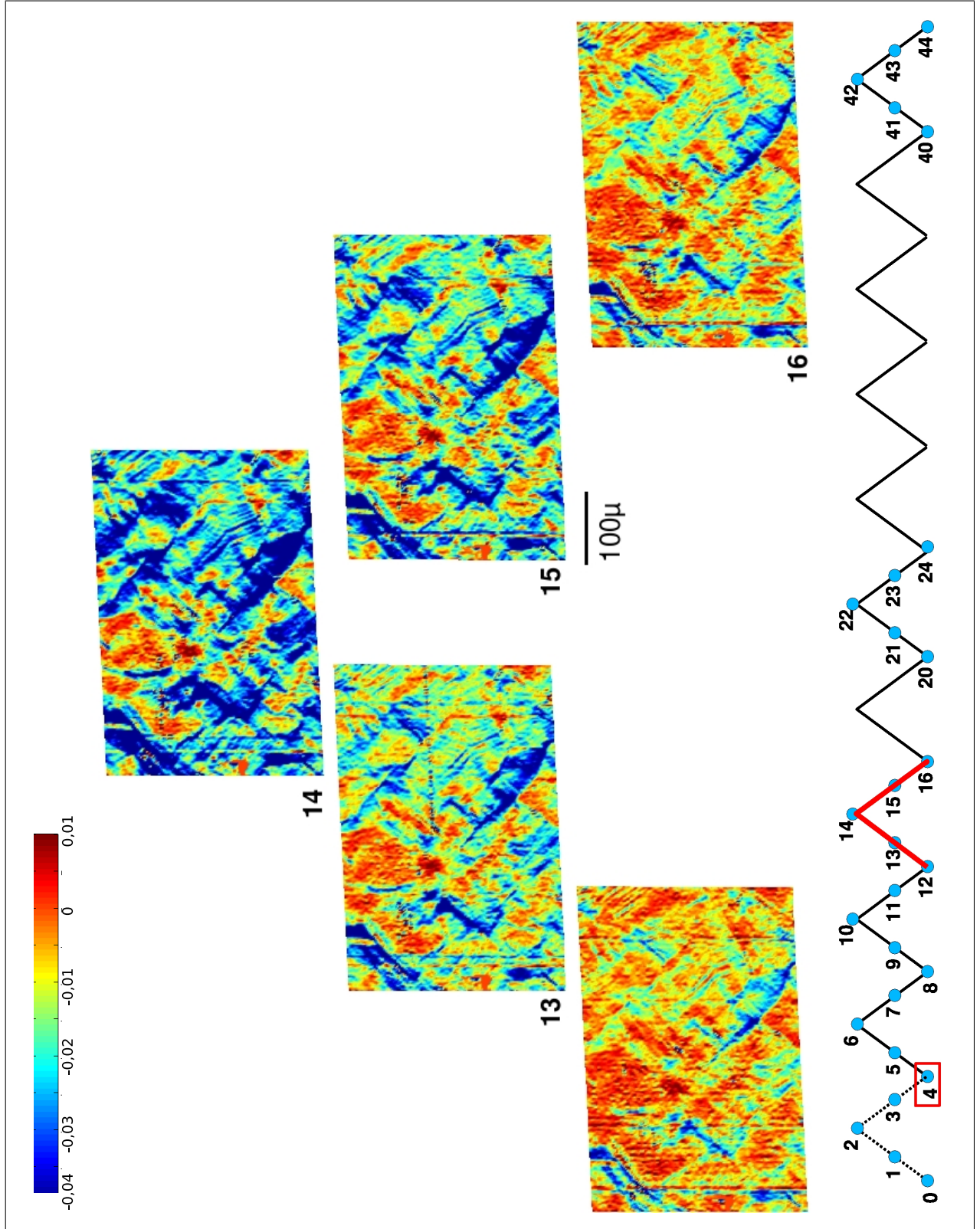


FIG. 4.14 – Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images *in situ* en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta \epsilon_{22} = 2\%$). 280 μm x 440 μm . Cycle 4.

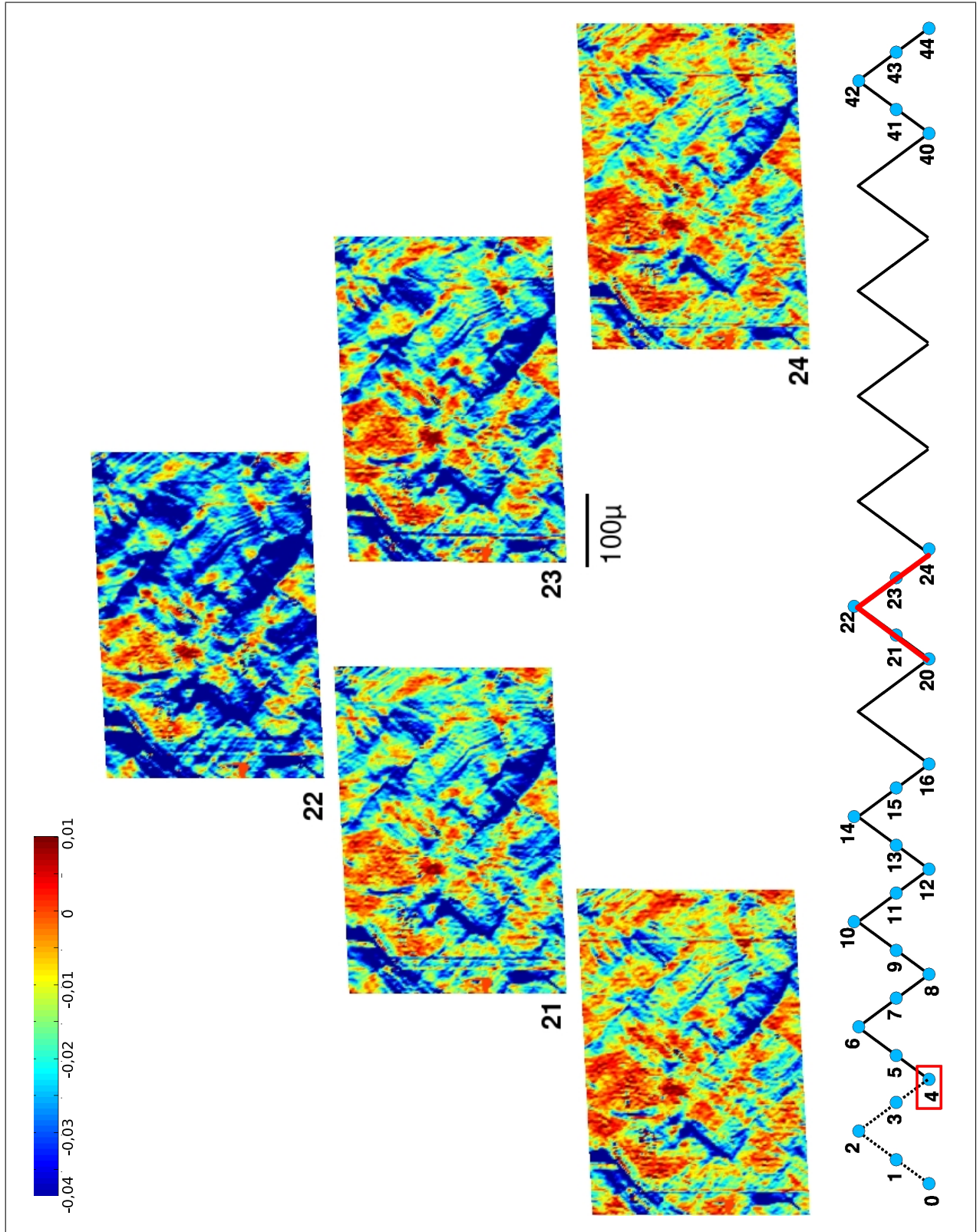


FIG. 4.15 – Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images *in situ* en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta \epsilon_{22} = 2\%$). $280 \mu\text{m} \times 440 \mu\text{m}$. Cycle 6.

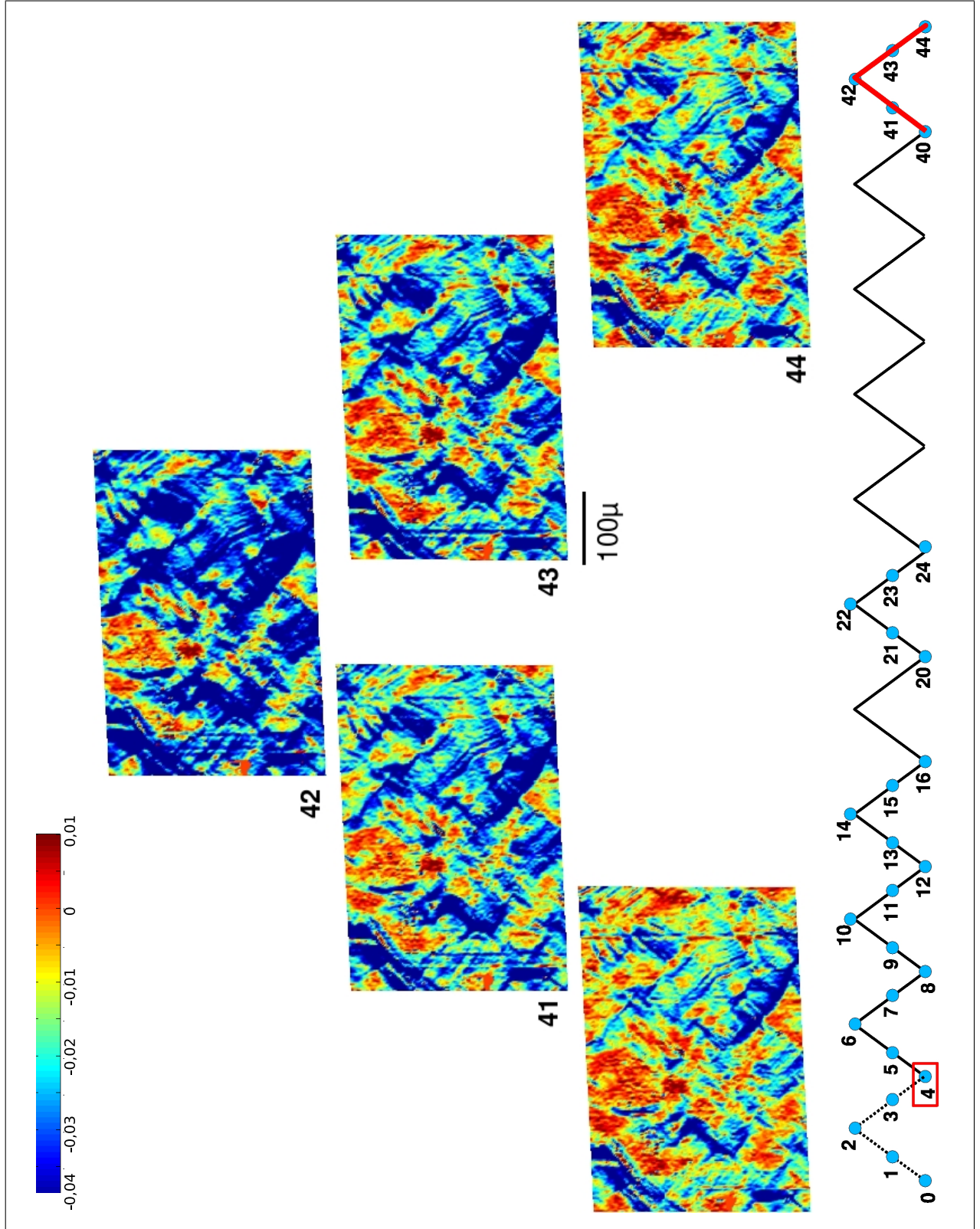


FIG. 4.16 – Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images *in situ* en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta \epsilon_{22} = 2\%$). $280 \mu\text{m} \times 440 \mu\text{m}$. Cycle 11.

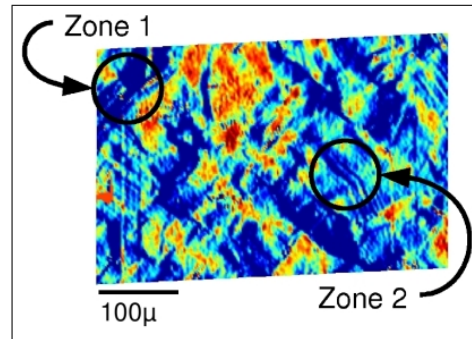


FIG. 4.17 – Emplacement des zones observées localement dans le champ de déformation observé. (stade n°22 du chargement)

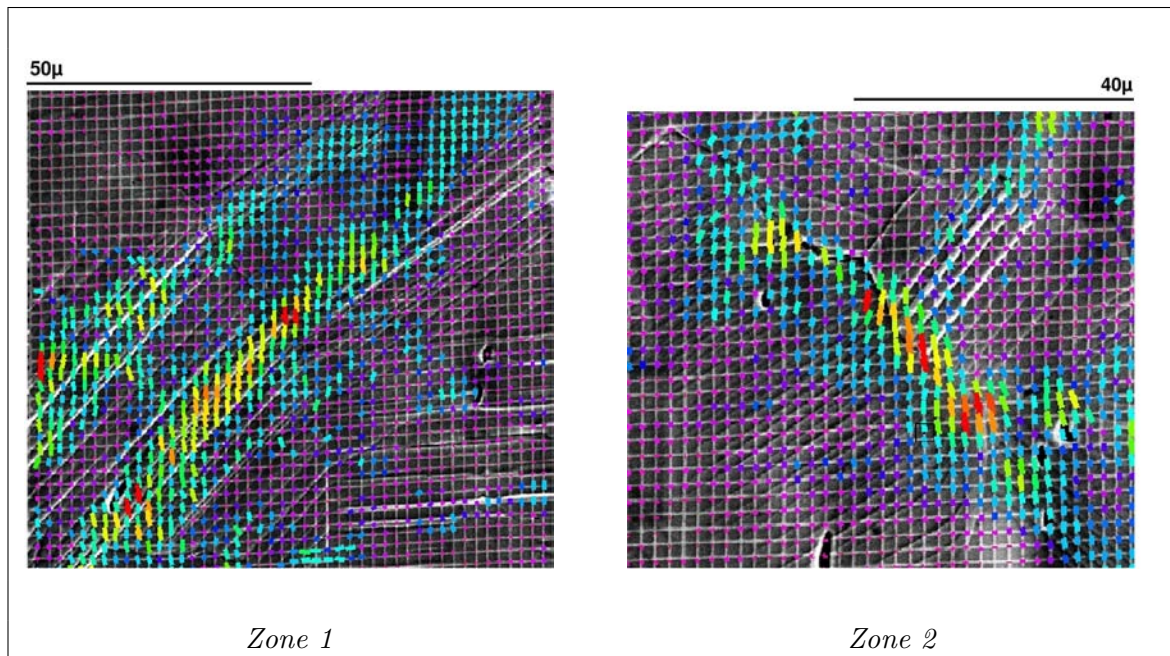


FIG. 4.18 – Superposition des champs de déformation équivalente de von Mises et des observations MEB de la localisation. Zone 1 : la localisation de la déformation suit les lignes de glissement intragranulaire. Zone 2 : le localisation s'effectue suivant les joints de grains, alors même que les lignes de glissement intragranulaire sont bien visibles. Pas de la grille : $2\ \mu\text{m}$.

4.3 Développement d'une représentation de la microstructure en vue d'une confrontation des champs de déformations obtenus expérimentalement et numériquement (calculs par éléments finis)

L'observation de la cartographie EBSD laisse apparaître une microstructure chahutée avec une dispersion importante de tailles de grains, une très forte proportion de macles, avec des relations de maclage à différents degrés, et une fréquente non-convexité des grains. Comme montrées au chapitre précédent, les représentations de microstructures polycristallines à partir de cartographie EBSD qui ont été réalisées s'appuyaient sur des microstructures beaucoup moins torturées, avec des grains strictement convexes, et une certaine homogénéité de taille de grains.

Une première approximation bi-dimensionnelle de la microstructure par des ellipses présente des zones particulièrement difficiles à traiter à cause d'un grand enchevêtrement des ellipses dans des zones où les grains sont particulièrement non-convexes. En conséquence, cette méthode a, pour le cas présent, été écartée.

Par ailleurs, sous l'angle de la morphologie mathématique, la microstructure étudiée présente quelques similitudes avec ce que produirait un modèle de type feuille morte à grains primaires avec des polygones de Poisson (voir la figure^{4.19} pour un exemple). Pour autant, la mise en œuvre tri-dimensionnelle de ce type de simulation a semblé *a priori* présenter de nombreuses difficultés de développement.

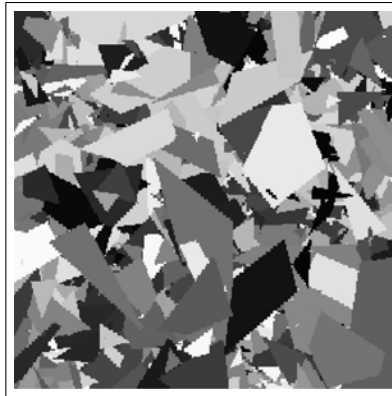


FIG. 4.19 – Exemple de simulation de microstructure obtenue avec un modèle de type feuille morte à grains primaires constitués de polygones de Poisson.

L'approche finalement retenue est celle des polyèdres de Voronoï contraints avec traitement

⁴Image aimablement fournie par D.Jeulin du Centre de Morphologie Mathématique de l'Ecole des Mines de Paris.

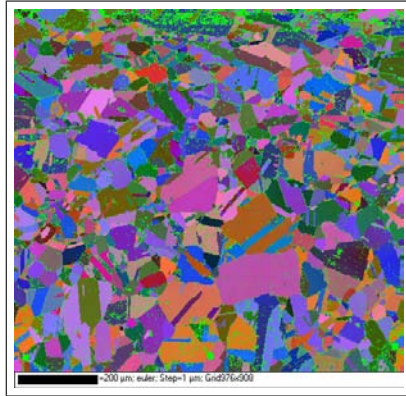
spécifique des macles. Pour ce faire, la démarche développée se découpe en plusieurs étapes.

1. Tout d'abord, la cartographie EBSD est nettoyée (*cf* annexe D, notamment page 210), post-traitée.
2. Puis la première couche de grains est réalisée en respectant la cartographie de surface.
 - La microstructure de surface est analysée et traitée afin d'en extraire toutes les macles. La microstructure bi-dimensionnelle obtenue est appelée « phase mère ».
 - Une procédure de croissance de grains orthogonalement à la surface, avec probabilité de croissance ou décroissance fonction de la section, est appliquée afin d'obtenir la première couche tri-dimensionnelle de grains.
 - Les macles sont réintroduites en surface dans la phase mère. Elles sont ensuite extrudées orthogonalement lorsque la macle se situe entre deux parties de grains de même orientation cristallographique. Sinon, elles le sont selon une orientation morphologique aléatoire.
3. Un volume représentatif est créé.
 - Une microstructure volumique composée de polyèdres de Voronoï est générée de telle sorte que la section moyenne d'un polyèdre soit représentative des plus petits grains de la phase mère.
 - Les polyèdres de Voronoï sont ensuite fusionnés avec leurs voisins les plus proches jusqu'à obtenir une microstructure dont la distribution de section de grains soit représentative de la phase mère. Les directions de propagation de la fusion n'étant pas définies par des règles d'isotropie, les grains obtenus sont souvent non-convexes, à l'instar de la phase mère.
 - Le volume est raccordé à la première couche de grains.
 - Enfin des macles sont jetées aléatoirement dans le volume, selon une probabilité fixée en regard de la surface.

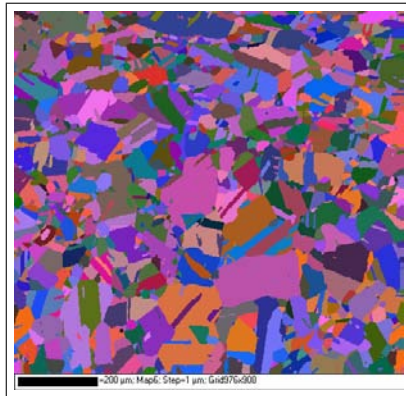
Ces différentes étapes sont reprises plus en détails ci-après, images à l'appui.

4.3.1 Cartographie EBSD et post-traitements

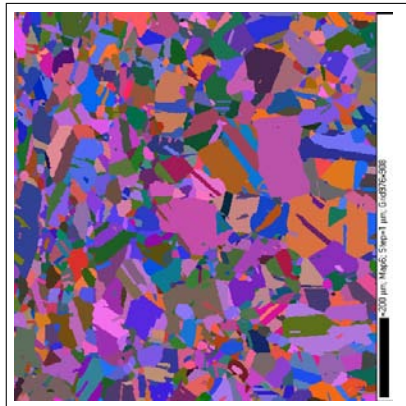
A l'issue de la mesure, la cartographie par EBSD comporte un certain nombre de points non indexés qu'il convient de traiter. La plupart se situe au niveau des joints de grains, ou *a fortiori* aux points triples. En effet, le faisceau diffracte alors sur plusieurs orientations cristallographiques simultanément. Le diagramme de Kikuchi obtenu n'est alors pas correctement indexé. Par ailleurs, la mesure de l'orientation cristallographique du grain est considérée fiable s'il y a au moins trois points analysés dans le grain. Les grains *a priori* de taille inférieure sont retraits. Il conviendra de se reporter à l'annexe D pour plus de détails sur la réalisation des cartographies EBSD et leur post-traitement.



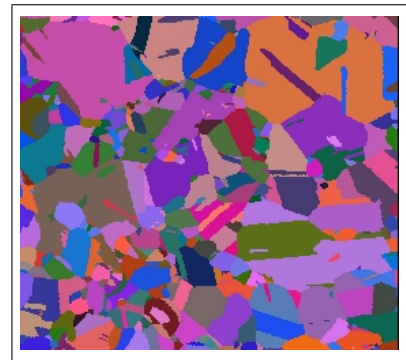
Cartographie brute, en sortie de mesure. Les points verts sont les points non indexés. Pour des questions d'imagerie, la cartographie EBSD est tournée de 90° par rapport au repère du chargement.



Premier nettoyage de la cartographie : élimination des points faux, des grains trop petits pour que la mesure soit considérée comme fiable, et homogénéisation de l'orientation cristalline au sein des grains.



Rotation de 90° dans le sens trigonométrique de l'image pour se placer dans le repère du chargement mécanique.



Sélection de la zone de mesure de champs grâce au plot d'or déposé à la surface de l'éprouvette et apparaissant comme amas de points non indexés sur la carte brute. Il s'agit du quart en bas à droite de l'image précédente.

FIG. 4.20 – Protocole d'extraction des données pour la génération de la surface de la microstructure représentative à partir de la cartographie expérimentale.

4.3.2 Première couche de grains : analyse et traitement de la surface

Détection des macles. Une macle est théoriquement située entre deux lobes d'un même grain avec lequel elle présente une désorientation de 60° par rapport à l'axe 001. Dans la pratique, ce cas d'école n'est pas le plus fréquent dans notre microstructure. En effet, la proportion importante de situations de maclage lors du traitement thermique engendre des relations cristallographiques complexes et pas toujours analysables (maclage à divers degrés). La détection des macles n'a donc pas pu se faire sur des bases cristallographiques, mais uniquement morphologiques.

La définition morphologique d'une macle repose sur le parallélisme de deux de ses bords. En effet, d'un point de vue « purement théorique », la partie maclée du cristal est l'image miroir de la partie non maclée, le plan de maclage faisant office de plan miroir. En conséquence, les deux plans faisant office de plan miroir sont parallèles. En pratique, les contraintes exercées au moment de l'apparition des macles occasionnent des distorsions. De plus, même dans les cas avec peu de distorsion, la pixelisation de l'image peut suffire à sortir des conditions de parallélisme.

Cette constatation nous a conduit à construire une procédure reposant sur la détection de parallélisme à l'aide de la transformée de Radon, procédure ensuite complétée par l'exclusion de cas trop litigieux, ou par l'ajout de cas sélectionnés sur des critères complémentaires de macles dont le parallélisme fait défaut.

Tout d'abord, la détection du parallélisme est réalisée avec une tolérance angulaire de 10° . Puis un test est effectué sur la longueur des segments détectés comme parallèles : cette dernière doit, en effet, être cohérente par rapport aux dimensions de la particule. En conséquence la longueur minimale retenue est définie selon :

$$l_{min} = \frac{c}{2,3}, \quad (4.1)$$

où c est la longueur de l'axe de plus grande projection de la particule. La valeur 2,3 est définie arbitrairement de façon à obtenir une bonne qualité de seuillage sur la microstructure étudiée ici.

Une fois les grains ayant deux bords parallèles détectés, trois critères sont appliqués pour exclure ceux qui ont *a priori* une faible probabilité d'être des macles.

- Les grains ayant une forme proche du « carré » rentrent dans le critère de détection. Cependant, après contrôle sur la cartographie EBSD, il s'avère qu'il n'y a pas pour autant de relation de maclage avec les grains voisins. En conséquence, tout grain dont le rapport de projection est inférieur à deux est exclu.
- Une particule ayant une forme de « papillon » peut parfaitement vérifier les critères de parallélisme, sans être une macle. Les grains de ce type sont exclus par une procédure de *watershed* (« ligne de partage des eaux »).
- Enfin, il est généralement impossible de statuer sur les caractéristiques réelles des grains situés au bord de la zone analysée. Ils sont donc systématiquement exclus de l'ensemble des macles.

Pour finir, les grains de toute petite taille sont parfois difficiles à analyser. Il a donc été décidé que lorsqu'ils sont insulaires (entièrement inclus dans un autre grain), ils sont systématique-

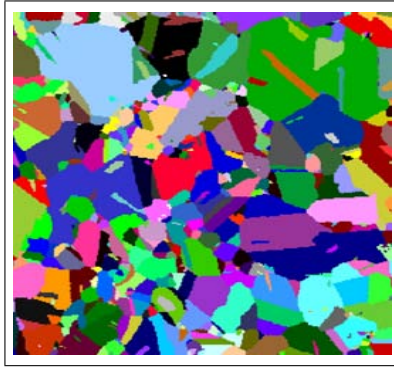
ment pris comme macle. Cette assertion est apparue raisonnable au regard de la cartographie EBSD.

Les résultats obtenus sont présentés à la figure 4.21.

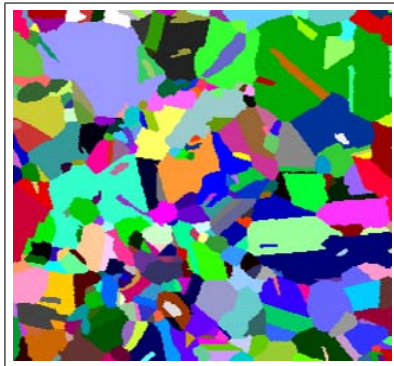
Définition du volume de la première couche de grains. Une fois les macles extraites, apparaît une cartographie de la phase mère en surface. Les grains sont alors définis en volume par croissance selon la direction orthogonale au plan de surface. Cette croissance est définie selon un critère reposant sur le volume final de chaque grain. Il est en effet considéré qu'un grain dont la section en surface est grande a de fortes chances de voir sa section diminuer lors de la croissance volumique, tandis qu'inversement une petite section aura plutôt tendance à croître.

De plus, il est supposé que la dispersion de tailles de grains observée en surface reflète la caractéristique volumique du matériau. La croissance des petits grains est donc limitée de façon à conserver cette caractéristique.

Définition volumique des macles dans la première couche de grains. Les macles sont extrudées orthogonalement à la surface pour celles qui, en surface, sont enchâssées entre deux grains de même orientation cristallographique. Lorsque ce n'est pas le cas, l'extrusion a une orientation morphologique aléatoire.



La cartographie est relabellisée afin de pouvoir identifier individuellement chacune des particules.



La carte est une nouvelle fois nettoyée.



Les macles sont détectées à l'aide des transformées de Radon, avec exclusions des cas trop litigieux. Les macles sont ensuite triées suivant qu'elles sont enchâssées entre deux grains de même orientations cristallographiques ou non.



FIG. 4.21 – Procédure de détection des macles en surface afin de pouvoir leur appliquer un traitement volumique spécifique.

4.3.3 Définition du volume de la microstructure

Définition de la phase mère. Un agrégat constitué de polyèdres de Voronoï est généré. La distance de répulsion entre germes est définie de telle sorte que la section moyenne d'un polyèdre de Voronoï corresponde à la plus petite surface de grain, appartenant à la phase mère, relevée sur la cartographie EBSD de surface (après traitement).

Les polyèdres de Voronoï sont ensuite fusionnés. Comme indiqué précédemment, aucune direction n'est privilégiée pour la fusion, étant donné que la cartographie EBSD ne fait pas apparaître, pour ce matériau, d'orientation morphologique particulière. La fusion est donc régie selon la taille des grains obtenus : l'histogramme de section des grains dans chaque plan de la microstructure doit tendre vers celui de la surface. La figure 4.22 présente la phase mère obtenue en surface après extraction des grains et suppression des macles, et l'agrégat volumique correspondant.

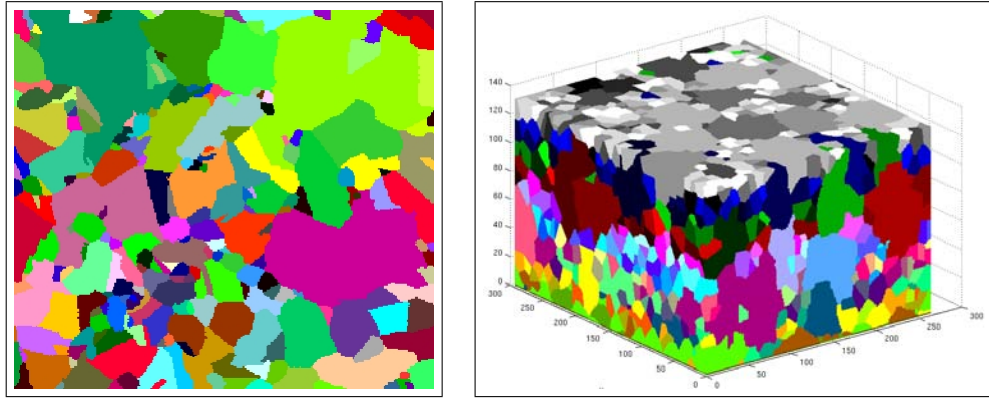


FIG. 4.22 – A gauche, cartographie de surface de la « phase mère » obtenue par extraction des macles de la cartographie EBSD. A droite, agrégat volumique généré pour décrire la phase mère.

Définition des macles dans le volume. Des macles, générées selon le protocole mis en place par Osipov à propos de lattes dans de la bainite [Osipov, 2007], sont jetées aléatoirement dans le volume.

4.3.4 Résultat obtenu

La microstructure finalement obtenue présente, grâce à la fusion non morphologiquement dirigée, des grains non convexes. Par ailleurs, la dispersion de tailles de grains est décrite. Enfin, la présence de macles est conservée. Les figures 4.23 et 4.24 présentent une des microstructures obtenues.

Plusieurs microstructures de ce type ont été générées afin de donner lieu à des calculs par éléments finis, et une confrontation aux mesures expérimentales.

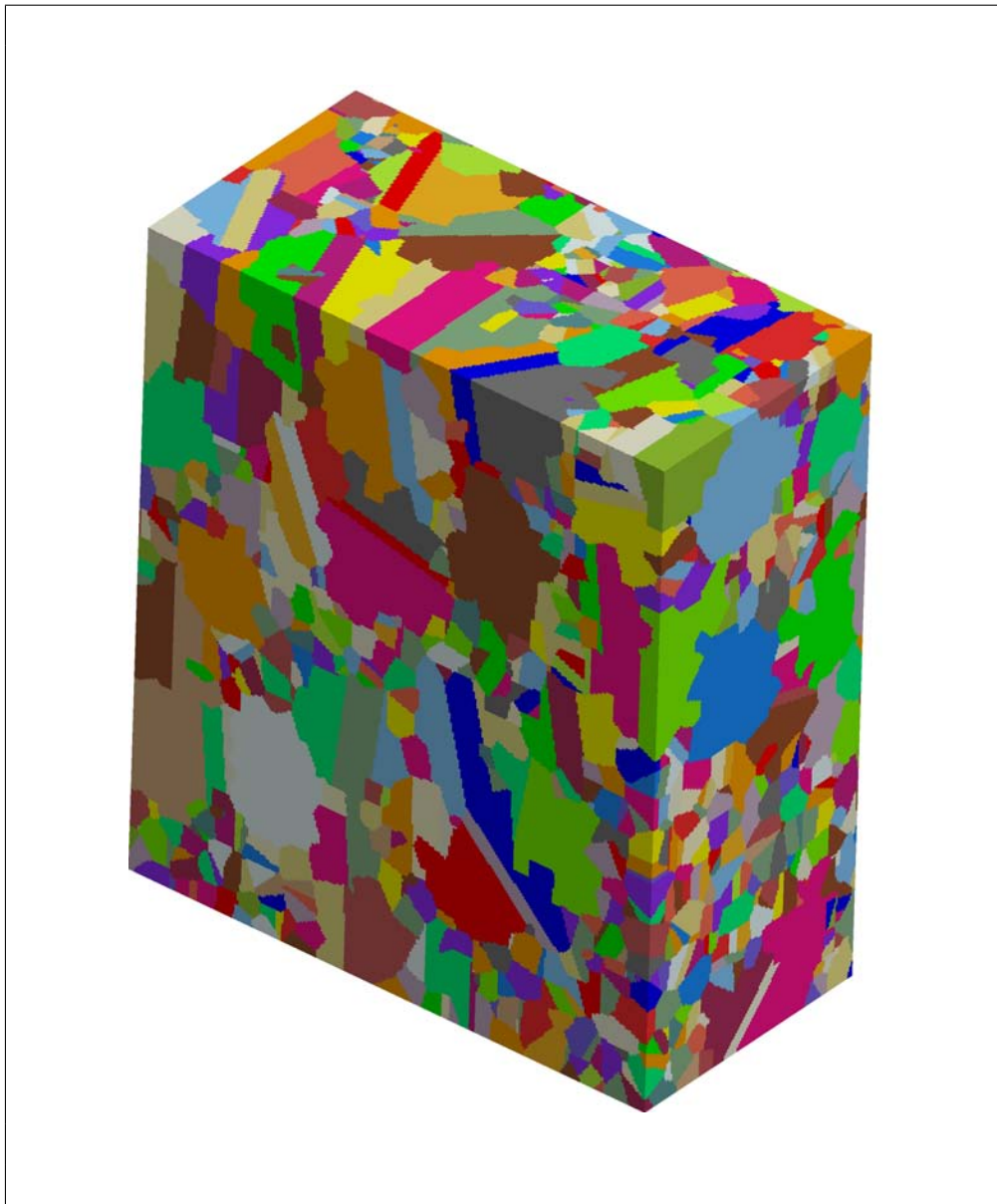


FIG. 4.23 – Microstructure obtenue. Les grains sont non convexes, la dispersion de tailles de grains est respectée, et la présence de macles conservée.

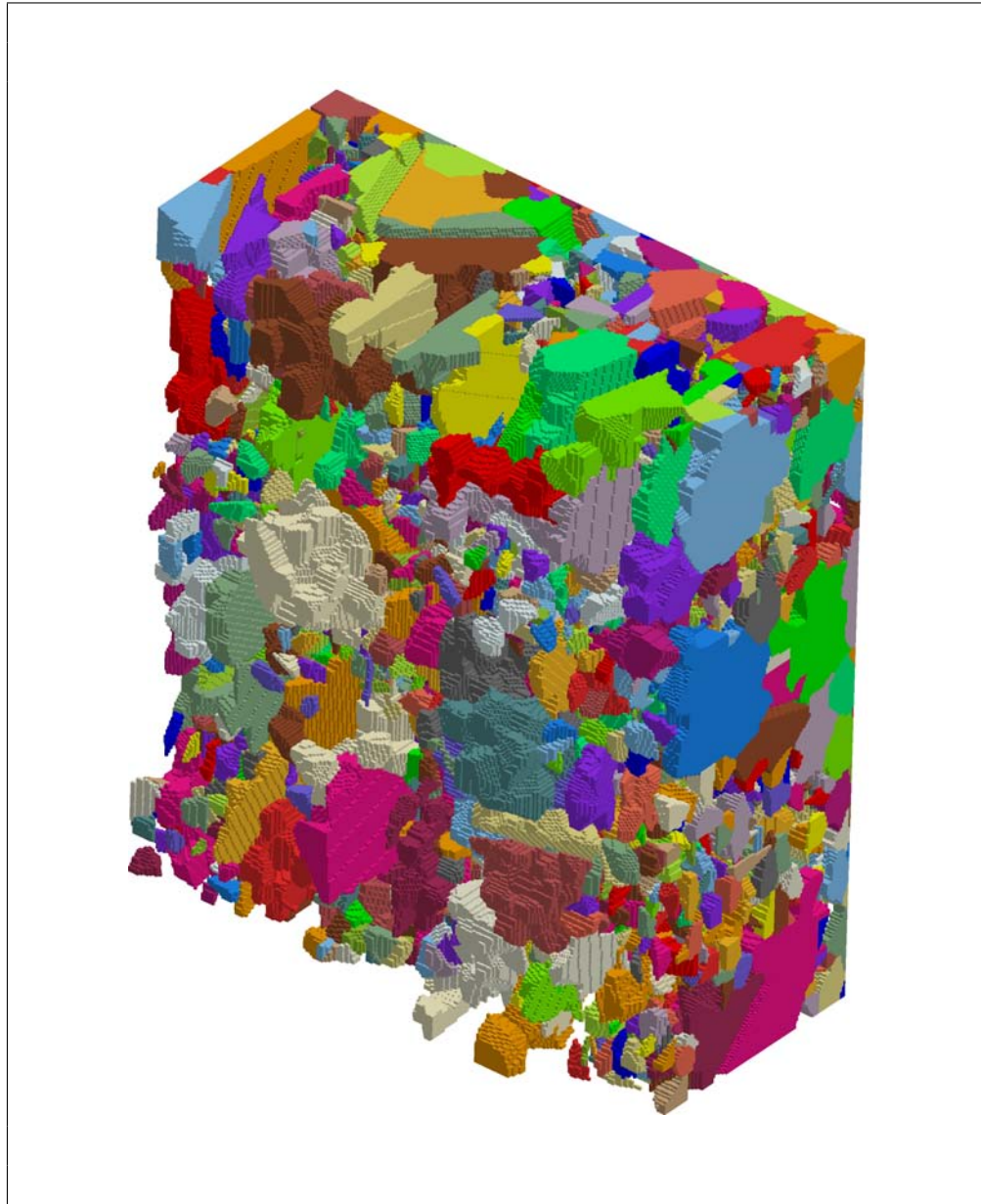


FIG. 4.24 – Microstructure obtenue : présentation de l'intérieur de la microstructure.

1. Des chargements composés de cisaillement et traction sont conduits, sur cuivre OFHC, *in situ* sous MEB. Les mesures de champs de déformation effectuées par corrélation d'images, sur une surface d'environ $500 \mu\text{m}^2$, montrent un schéma de localisation complexe, comportant plusieurs échelles de déformation. L'une d'elles a manifestement une portée bien supérieure à la zone étudiée, rendant difficile l'interprétation des covariogrammes associés. Toutefois, la superposition de la microstructure (joints de grains extraits de la cartographie EBSD) et du champ de déformation permet, par comparaison aux résultats de Doumalin [Doumalin, 2000], de formuler l'hypothèse d'une complexité du champ de déformation due notamment à celle de la morphologie de la microstructure.
2. Un essai de sollicitation cyclique, en traction-compression, est réalisé. L'amplitude du chargement est de 2%, la déformation moyenne est non nulle. Des mesures de champs par corrélation d'images numériques acquises sous MEB sont réalisées à différents stades de chaque cycle, et ce pour plusieurs cycles.

La déformation transverse moyennée sur la zone d'étude montre nettement un phénomène de rochet local.

Plusieurs observations sont faites concernant l'évolution du schéma de localisation de la déformation.

- Le schéma de localisation est déjà en place dès le second cycle. Il restera le même tout au long du chargement. Aucune bande de localisation n'apparaît ni ne disparaît par la suite.
- Au sein d'un même cycle, les bandes de localisation apparaissent, se renforcent jusqu'à la sollicitation maximale, pour diminuer ensuite, jusqu'à quasi disparaître.
- D'un cycle à l'autre les bandes réapparaissent au même endroit, mais en s'intensifiant et en s'élargissant légèrement. Le phénomène d'intensification semble plus marqué que celui de l'élargissement.
- Les zones non déformées le restent tout au long du chargement ; leur présence permet de valider la technique de mesure utilisée.

L'évolution du schéma de localisation est en accord avec le constat de rochet local observé sur la moyenne (sur le champ) de la composante transverse de la déformation.

3. Une microstructure est développée afin de permettre de réaliser les calculs par éléments finis correspondant à la sollicitation expérimentale, et de confronter les champs expérimentaux et simulés. Cette microstructure décrit en surface la cartographie EBSD effectuée sur la zone de l'échantillon où ont été conduites les mesures de champs. L'obtention du volume repose sur la génération d'un agrégat de polyèdres de Voronoï qui sont ensuite fusionnés pour décrire la dispersion de tailles de grains. La microstructure finalement obtenue présente, grâce à la fusion non morphologiquement dirigée, des grains non convexes. Par ailleurs, la dispersion de tailles de grains est décrite. Enfin, la présence de macles est conservée.
-

Troisième partie

Comportement polycristallin : échelle du VER

Chapitre 5

Analyse bibliographique

"True genius resides in the capacity for evaluation of uncertain, hazardous, and conflicting information."
sir Winston Churchill (1874-1965)

*L*A DESCRIPTION du comportement du polycristal passe par le choix d'un modèle de transition d'échelles. Dans le cadre de la démarche d'homogénéisation, deux mises en œuvre sont ici abordées : les calculs éléments finis, et les modèles à champs moyens. La première approche conduit inéluctablement à la question de la définition d'un volume élémentaire représentatif (VER). La seconde passe par le choix d'un modèle et la question de sa représentativité. Ce chapitre propose une rapide revue des éléments bibliographiques.

5.1 Analyse bibliographique

Compte tenu du contexte de la confrontation menée au chapitre 6, nous nous limiterons à l'étude des polycristaux, et avec une élasticité de nature isotrope.

Le cuivre relève certe de la symétrie cubique, mais l'approximation de l'élasticité isotrope est ici considérée pour l'ensemble des modèles étudiés. La confrontation relative n'en souffre donc pas. En revanche, cette hypothèse permet de ne pas « polluer » le problème plastique avec une instabilité supplémentaire. De plus, le modèle de Berveiller-Zaoui, qui entre ici dans le panel de comparaison, requiert cette condition.

5.1.1 Homogénéisation : rappel de la méthodologie

Représentation

Toute démarche d'homogénéisation nécessite en premier lieu de définir les échelles en présence et les caractéristiques géométriques retenues pour décrire le matériau.

Considérons donc un matériau hétérogène, dont les propriétés mécaniques varient sur une distance caractéristique microscopique devant l'échelle du volume élémentaire macroscopique à laquelle le matériau est considéré homogène. L'échelle microscopique est ici définie par la phase, qui se caractérise, dans le cas des polycristaux à grains équiaxes, par son orientation cristallographique et sa morphologie. Toutes les phases ont donc mêmes caractéristiques physico-chimiques et même loi de comportement.

Pour les polycristaux, le schéma de microstructure généralement retenu est celui d'une microstructure aléatoire constituée de phases distinctes parfaitement accolées. L'hypothèse de phase sphérique est ici utilisée.

Estimation du comportement

La première étape est appelée localisation de la déformation ou concentration de la contrainte suivant la grandeur utilisée. Elle permet de relier la déformation, respectivement la contrainte, locale à la grandeur macroscopique correspondante. L'étape de localisation doit vérifier :

- la compatibilité ($\underline{\epsilon}$ cinématiquement admissible),
- l'équilibre ($\underline{\sigma}$ statiquement admissible),
- la loi de comportement local.

La seconde étape est l'homogénéisation. Elle détermine le comportement effectif du matériau étudié. A chaque instant t , la contrainte macroscopique $\underline{\Sigma}$ (respectivement la déformation macroscopique $\underline{\mathbf{E}}$) est définie comme la moyenne spatiale des contraintes (respectivement des

déformations) locales :

$$\underline{\Sigma}(t) = \frac{1}{V} \int \underline{\sigma} dV \quad \text{et} \quad \underline{\mathbf{E}}(t) = \frac{1}{V} \int \underline{\varepsilon} dV. \quad (5.1)$$

Dans le cas des polycristaux, l'opération de moyenne spatiale réalisée ici est une moyenne sur l'ensemble des orientations cristallines, pondérée par les fractions volumiques respectives.

5.1.2 Notion de VER et approche par éléments finis

Les éléments finis peuvent donner lieu à une approche par homogénéisation. La localisation est alors assurée par calcul numérique « exact », tandis que l'étape d'homogénéisation est une moyenne spatiale effectuée sur l'agrégat.

L'approche par éléments finis pose plusieurs questions spécifiques.

- Quelle microstructure ?
- Quelles conditions aux limites ?
- Combien d'éléments, de grains, de réalisations, sont nécessaires à une bonne description du volume élémentaire représentatif ?

Quelle microstructure ?

L'une des microstructures tridimensionnelles les plus souvent utilisées pour la description des polycristaux ([Barbe, 2000], [Lebensohn *et al.*, 2005], ...) est celle des polyèdres de Voronoï [Gilbert, 1962].

Cette méthode est basée sur une division de l'espace en « zones d'influence » d'un jeu de points particuliers [Decker et Jeulin, 2000]. Soit $D \subset \mathbb{R}^2(\mathbb{R}^3)$ un domaine réel, et $E = A_i$ un jeu de N points tirés aléatoirement tels que $A_i \in D$. Soit également $d(P_1, P_2)$ la distance euclidienne entre deux points P_1 et P_2 . La zone d'influence z_i de centre A_i est définie par :

$$z_i(A_i) = \{P \in D | d(P, A_i) < d(P, A_j) \forall j \neq i\}. \quad (5.2)$$

Les centres des polyèdres peuvent être distribués dans l'espace de façon aléatoire.

5.1.3 Quelles conditions aux limites ?

Le choix des conditions aux limites peut s'avérer primordial dans un calcul éléments finis car la qualité du résultat en dépend.

Les conditions aux limites périodiques consistent à imposer à la frontière un déplacement moyen selon les différentes directions, plus une variation périodique des degrés de liberté à la frontière. Le vecteur déplacement s'écrit alors :

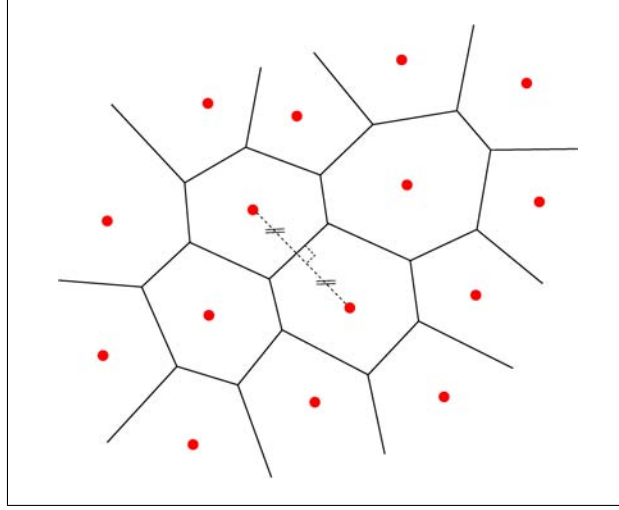


FIG. 5.1 – Cellules de Voronoï schématisant une structure cristalline en 2D.

$$\underline{\mathbf{u}}_G = \underline{\mathbf{E}}\underline{\mathbf{x}} + \underline{\mathbf{v}}_G(\underline{\mathbf{x}}) \quad (5.3)$$

où $\underline{\mathbf{x}}$ est le vecteur position, $\underline{\mathbf{E}}$ le tenseur moyen de déformation, et G le groupe des nœuds concernés.

Les conditions de périodicité sont imposées de façon commune aux groupes de nœuds liés par une condition géométrique de périodicité. Dans le cas très simple d'un cube, tous les sommets appartiennent au même groupe de périodicité, les arêtes parallèles définissent elles aussi un groupe. Enfin, les nœuds situés sur une face, arêtes et sommets non compris, sont en correspondance avec la face opposée.

Sur des structures plus complexes, la détermination des groupes de périodicité nécessite un traitement automatisé recherchant pour chaque nœud un ou plusieurs correspondants grâce aux vecteurs unitaires de périodicité et à leurs composés (voir figure 5.2 pour plus de détails). Outre la préparation nécessaire, l'application de ces conditions aux limites demandent quasiment deux fois plus de mémoire vive pour la réalisation des calculs.

En revanche, ce type de conditions aux limites est connu pour être la meilleure représentation du VER plongé dans un milieu infini. Elle n'engendre en effet aucune perturbation, puisqu'il n'y a pas à proprement parler de surface pour l'agrégat.

La déformation homogène au contour $\partial\Omega$ permet d'imposer à chaque nœud du contour un vecteur $\underline{\mathbf{u}}$ tel que :

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\mathbf{E}}.\underline{\mathbf{x}} \text{ sur } \partial\Omega. \quad (5.4)$$

Ce type de conditions aux limites impose aux faces de rester planes, ce qui induit une perturbation des champs mécaniques à proximité des bords.

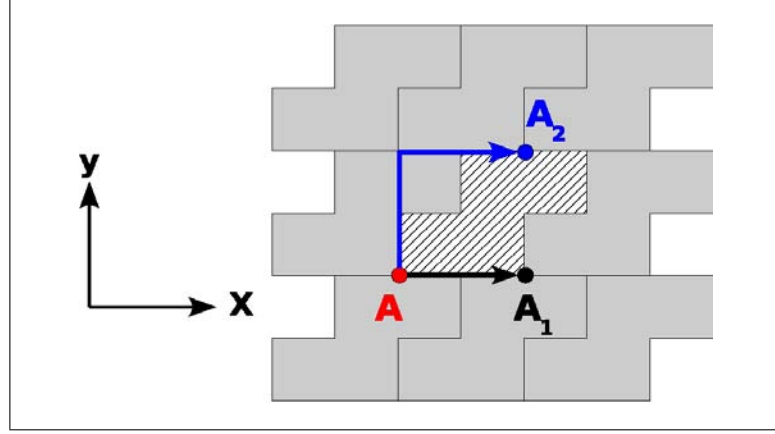


FIG. 5.2 – Schéma d'une structure bidimensionnelle périodique. Les seuls vecteurs de base ne suffisent pas à déterminer l'ensemble des points correspondants de cette cellule de base. Le point A admet A_1 et A_2 pour correspondant. A_1 se définit par translation du point A par le vecteur de base \underline{x} , tandis que le point A_2 s'obtient par translation du vecteur $(\underline{x} + \underline{y})$.

La contrainte homogène au contour $\partial\Omega$ consiste à imposer à chaque nœud de la surface les composantes du vecteur contrainte :

$$\underline{f} = \underline{\sum} \cdot \underline{n} \text{ sur } \partial\Omega, \quad (5.5)$$

où \underline{n} est la normale extérieure à la surface du VER au nœud considéré.

Ce type de condition aux limites nécessite de prêter particulièrement attention au traitement de la géométrie de la surface puisque son évolution est couplée à celle de la force.

L'utilisation de la surface libre ne correspond pas vraiment à l'état du VER plongé dans un milieu infini et engendre un adoucissement de cette partie du maillage.

La planéité des surfaces peut être imposée en définissant l'égalité d'un degré de liberté en déplacement pour tous les nœuds de la face :

$$u_n(G) = C^{ste}. \quad (5.6)$$

Il s'agit d'une contrainte multi-point, qui est de fait intermédiaire entre les deux configurations précédentes.

Combien d'éléments, de grains, de réalisations sont nécessaires à une bonne description du volume élémentaire représentatif ?

En 2003, Kanit a publié plusieurs résultats, en élasticité linéaire, concernant la définition du VER dans le cadre de l'utilisation des calculs éléments finis comme procédé d'homogénéisation [Kanit, 2003], [Kanit *et al.*, 2003]. Ainsi, la représentation du comportement homogénéisé peut être obtenue aussi bien à l'aide d'un volume suffisamment grand pour être statistiquement

représentatif, que par une multitude de petits volumes sur lesquels les grandeurs macroscopiques sont moyennées.

Le VER est le volume nécessaire pour identifier une grandeur mécanique moyenne, pour un intervalle de confiance et un nombre de réalisations donnés. Il s'agit donc d'une définition de nature statistique, propre à chaque grandeur, pour chaque matériau.

Kanit évoque également une taille minimale de VER en dessous de laquelle l'estimation serait entachée d'erreur, quel que soit le nombre de réalisations. Enfin, il souligne que la taille du VER dépend de la grandeur étudiée.

En 2006, Madi [Madi, 2006] étend les travaux de Kanit [Kanit, 2003] au cas viscoplastique.

En 2007, Siska [Siska, 2007], à partir des travaux de Kanit [Kanit, 2003] et Madi [Madi, 2006], utilise un VER sous forme d'approche statistique. Les grandeurs sont alors moyennées sur n agrégats du même nombre de grains. n est considéré suffisamment grand pour décrire le comportement du VER lorsque :

$$\frac{D(Z)}{\sqrt{n\bar{Z}}} \leq 1\% \quad (5.7)$$

où $D(Z)$ est l'écart-type de la grandeur Z sur les réalisations, \bar{Z} la valeur moyenne de Z sur les n réalisations.

A ce jour, le VER a donc été préférentiellement défini, dans le cadre de l'approche éléments finis, par des considérations se situant à l'échelle globale.

5.1.4 Estimation en champs moyens : rapide revue des principaux modèles

Premières approches : champs homogènes

Dans une première approche, reprise plus tard par Batdorf & Budiansky [Batdorf et Budiansky, 1949], Sachs [Sachs, 1928] postule l'uniformité de la plus grande cis-sion critique. Dans le même esprit, l'approche statique suppose l'uniformité des champs de contraintes :

$$\underline{\sigma}^0 = \underline{\Sigma}. \quad (5.8)$$

Ce type de modèle conduit à une réponse macroscopique trop « souple ».

En 1928, Taylor [Taylor, 1938] propose l'approche duale en considérant l'homogénéité des déformations et en les assimilant à la déformation plastique :

$$\underline{\mathbf{E}} = \underline{\varepsilon}^0 = \underline{\varepsilon}_p^0. \quad (5.9)$$

Les contraintes internes et les déformations élastiques sont ainsi négligées.

Lin [Lin, 1957], en 1957, conserve la même approche, mais sans négliger les déformations élastiques. Ceci conduit pour un matériau élastoplastique isotrope à la règle d'interaction :

$$\underline{\sigma}^0 = \underline{\Sigma} + 2\mu(\underline{\mathbf{E}}_p - \underline{\varepsilon}_p^0), \quad (5.10)$$

où μ est le module de cisaillement élastique. La réponse obtenue est trop « raide ».

Le problème d'Eshelby en élasticité linéaire

Bon nombre de modèles reposent sur l'hypothèse qu'une phase ϕ peut être représentée comme une inclusion ellipsoïdale plongée dans une matrice représentant le milieu environnant. Celle-ci est un milieu homogène virtuel soumis à des conditions homogènes à l'infini. Cette hypothèse peut être justifiée dans certains cas particuliers et sous certaines considérations de distributions spatiales. Dans le cadre de l'approche « auto-cohérente », considérée en général comme pertinente pour les polycristaux, ce milieu infini se voit attribuer les propriétés du « milieu homogène équivalent » (MHE).

Dans le cadre des comportements linéaires, et en considérant la cohésion parfaite entre inclusion et matrice, la solution du problème en contrainte et déformation dans l'inclusion a été donnée par Eshelby en 1957 [Eshelby, 1957], à partir de la solution du problème de l'inclusion en milieu infini non contraint à l'infini, subissant une déformation libre $\boldsymbol{\varepsilon}^l$. La déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^l$ que subirait l'inclusion i si elle n'était pas plongée dans la matrice est appelée « déformation libre de contrainte ». La déformation de la dite inclusion i une fois plongée dans la matrice (MHE) s'écrit alors :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i = \mathbf{\tilde{S}} : \boldsymbol{\varepsilon}^l, \quad (5.11)$$

où $\mathbf{\tilde{S}}$ est le tenseur d'interaction d'Eshelby, produit du module élastique $\mathbf{\tilde{C}}$ (pris identique dans le milieu et l'inclusion) et d'une intégrale de l'opérateur de Green modifié $\mathbf{\tilde{G}}$ (se rapporter à [Bornert *et al.*, 2001b] pour plus de détails).

La contrainte dans l'inclusion $\boldsymbol{\sigma}^i$ qui en résulte, ou contrainte d'accommodation, vaut :

$$\boldsymbol{\sigma}^i = \mathbf{\tilde{C}} : (\boldsymbol{\varepsilon}^i - \boldsymbol{\varepsilon}^l). \quad (5.12)$$

Le comportement ou les propriétés du MHE doivent être estimées. Or les comportements des phases et du MHE sont le plus souvent élastoplastiques, donc non linéaires, et dépendant de l'histoire des déformations. Il sera donc nécessaire de linéariser le problème afin de se ramener à celui dont la solution est donnée par le problème de l'inclusion d'Eshelby.

Modèles dérivés de la solution d'Eshelby pour le comportement élastoplastique des polycristaux

L'approche de Kröner. En 1961, Kröner [Kröner, 1961] propose une première extension du schéma auto-cohérent à la prédiction du comportement élastoplastique des polycristaux. Il utilise le problème de l'inclusion d'Eshelby en attribuant au milieu infini un comportement élastoplastique dans lequel la déformation plastique est uniforme et égale à la déformation plastique macroscopique. Les variations de contraintes sont ainsi pilotées par la différence entre déformation plastique macroscopique \mathbf{E}_p et déformation par phase $\boldsymbol{\varepsilon}^\phi$ (*i.e.* de l'inclusion) au travers des propriétés élastiques du milieu infini. La loi d'interaction s'écrit alors :

$$\boldsymbol{\sigma}^\phi = \mathbf{\tilde{\Sigma}} + \mathbf{\tilde{C}} : (\mathbf{\tilde{I}} - \mathbf{\tilde{S}}) : (\mathbf{E}_p - \boldsymbol{\varepsilon}_p^\phi), \quad (5.13)$$

où \mathbf{I} est le tenseur identité pour l'espace des tenseurs d'ordre 4 symétriques.

Dans le cas d'une inclusion sphérique, l'expression se ramène simplement à :

$$\tilde{\sigma}^\Phi = \tilde{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)(\mathbf{E}_p - \tilde{\varepsilon}_p^\Phi) \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)}. \quad (5.14)$$

Pour un coefficient de Poisson de 0,3, l'expression de la contrainte dans la phase est donc proche de :

$$\tilde{\sigma}^\Phi = \tilde{\Sigma} + \mu(\mathbf{E}_p - \tilde{\varepsilon}_p^\Phi) \quad (5.15)$$

où μ est le module de cisaillement élastique.

Comme $\mu \gg \sigma_\Phi \sim \varepsilon$, il vient nécessairement $\mathbf{E}_p \sim \varepsilon_p^p$. Le modèle est alors très proche de celui de Lin-Taylor. Les interactions intergranulaires sont surestimées. L'estimation du comportement est trop raide.

Approximation élastoplastique incrémentale de Hill. En 1965, Hill [Hill, 1965] propose une formulation alternative dans laquelle il traite le problème de façon incrémentale, se ramenant à chaque pas à la résolution d'un problème linéaire en s'appuyant sur une linéarisation des lois de comportement locales :

$$\dot{\sigma} = l : \dot{\varepsilon}. \quad (5.16)$$

Dans cette loi linéarisée le module instantané l est de nature élastoplastique, *i.e.* prend en compte l'accumulation plastique locale.

La réponse mécanique moyenne de chaque phase est alors modélisée par celle d'une hétérogénéité de module l^{ep} plongée dans un milieu infini de module uniforme, et égal au module élastoplastique macroscopique cherché. La nature élastoplastique, et non plus élastique, des modules instantanés conduit à assouplir les interactions entre phases. Les prédictions du comportement sont ainsi nettement plus réalistes qu'avec la formulation de Kröner.

Le modèle de Berveiller-Zaoui. En 1979, Berveiller et Zaoui [Berveiller et Zaoui, 1979] proposent une formulation sécante s'appuyant sur la démarche de Hill. Il s'agit là d'une approche intégrée valable dans les cas des matériaux polycristallins isotropes, pour des chargements monotones et radiaux. En considérant une inclusion élastoplastique sphérique plongée dans un milieu élastoplastique de module approché sécant, la règle d'interaction s'écrit alors :

$$\tilde{\sigma}^\Phi = \tilde{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\mathbf{E}_p - \tilde{\varepsilon}_p^\Phi) \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)}, \quad \text{et} \quad \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{E^{Mises}}{\Sigma^{Mises}}, \quad (5.17)$$

où E^{Mises} et Σ^{Mises} sont respectivement la déformation et la contrainte équivalente de von Mises :

$$\mathbf{E}^{Mises} = \sqrt{\frac{2}{3}} \varepsilon_p : \varepsilon_p \quad \text{et} \quad \Sigma^{Mises} = \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{s} : \mathbf{s}. \quad (5.18)$$

L'évolution du module approché considéré permet une bonne prise en compte de l'écrouissage des polycristaux au travers du ratio $\frac{E^{Mises}}{\Sigma^{Mises}}$.

Approximation par approche phénoménologique : le modèle de « la règle en β ». Le modèle en β , introduit en 1987 par Cailletaud [Cailletaud, 1987], ré-investi par Pilvin en 1990 [Pilvin, 1990], puis approfondi par Cailletaud et Pilvin en 1994 [Pilvin et Cailletaud, 1994], écrit la loi d'interaction à l'aide d'une variable interne d'accommodation β^φ phénoménologique, qui évolue de façon non linéaire en fonction de la déformation plastique. Ceci permet de représenter l'accommodation plastique, en limitant de contraintes internes intergranulaires. En fait, au lieu de multiplier la différence de déformation plastique par un terme non linéaire, comme dans le modèle de Hill ou de Berveiller-Zaoui, la présente règle reporte la non-linéarité sur la variable β , en conservant le terme linéaire du modèle de Kröner. Dans le cas d'une morphologie de phases sphériques et de l'élasticité isotrope, la règle d'interaction s'écrit alors :

$$\sigma^\varphi = \tilde{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)(\mathbf{B} - \beta^\varphi) \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad \text{et} \quad \mathbf{B} = \langle \beta^\varphi \rangle. \quad (5.19)$$

La variable d'accommodation β^φ admet pour loi d'évolution :

$$\dot{\beta}^\varphi = \dot{\tilde{\epsilon}}_p^\varphi - D(\beta^\varphi - \delta \tilde{\epsilon}_p^\varphi) \|\dot{\tilde{\epsilon}}_p^\varphi\|, \quad (5.20)$$

où D et δ sont deux paramètres à identifier.

La loi d'évolution de cette nouvelle variable est contrôlée par la déformation inélastique de la phase et le second terme permet de limiter sa saturation quand la déformation augmente.

En 2006, Sai, Cailletaud et Forest [Sai et al., 2006] ont utilisé une version plus complète de ce modèle permettant la description des matériaux anisotropes, formulation appliquée dans le cas de matériaux à solidification dirigée [Sai et al., 2006], en confrontation avec des calculs éléments finis. Une bonne estimation du comportement est obtenue.

Modèles pour le comportement non-linéaire viscoplastique des polycristaux

Ces modèles négligent l'élasticité, et sont donc essentiellement utilisés dans le cadre des grandes transformations.

La résolution du problème de localisation viscoplastique s'effectue en vitesse. Comme toute étape de localisation, la compatibilité, l'équilibre, et la loi de comportement locale, doivent être vérifiés ; mais la localisation est définie, et résolue, en vitesse de déformation. Ainsi, en tout point x , la loi de comportement viscoplastique non linéaire s'écrit sous la forme :

$$\dot{\tilde{\epsilon}}(x) = \frac{\partial \omega(\underline{\sigma})}{\partial \underline{\sigma}} \quad (5.21)$$

où ω est un potentiel convexe de dissipation des contraintes $\underline{\sigma}$.

L'homogénéisation est également définie en vitesse de déformation :

$$\dot{\tilde{\mathbf{E}}}(t) = \frac{1}{V} \int \dot{\tilde{\epsilon}} dV \quad \text{et} \quad \tilde{\Sigma}(t) = \frac{1}{V} \int \underline{\sigma} dV. \quad (5.22)$$

Les estimations du comportement non-linéaire viscoplastiques des polycristaux, présentées ci-après, s'articulent en deux temps :

- la linéarisation du comportement des phases constitutives du matériau considéré, conduisant à la définition d'un milieu de comparaison linéaire ;
- une homogénéisation linéaire des propriétés de ce milieu de comparaison, qui permet d'accéder à l'estimation du comportement du matériau.

Les uns, diffèrent essentiellement par la méthode de linéarisation utilisée. Il s'agit des approximations de Hutchinson [Hutchinson, 1976], du modèle de Molinari et al. [Molinari *et al.*, 1987], et de l'estimation par linéarisation affine [Masson, 1998], [Brenner *et al.*, 2001]. Ils sont issus de l'extension classique du schéma auto-cohérent aux comportements non-linéaires. Leur point commun est de négliger le rôle de l'hétérogénéité intraphase dans l'étape de linéarisation.

Les autres, fondés sur les méthodes variationnelles, visent à pallier cette carence [Ponte-Castaneda, 1991], [Ponte-Castaneda, 1996].

Approximation viscoplastique de Hutchinson. Hutchinson, en 1976 [Hutchinson, 1976], avait déjà construit une formulation en viscoplasticité en s'appuyant sur une représentation du matériau reposant sur un milieu linéaire de comparaison. Ce dernier est de type visqueux linéaire ; ses caractéristiques sont définies par les complaisances tangentes. Sa réponse globale s'écrit :

$$d\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{M}}^v : d\tilde{\Sigma}, \quad (5.23)$$

et l'incrément de contrainte locale est lié à l'incrément de contrainte macroscopique par la relation linéaire :

$$d\tilde{\sigma} = \tilde{\mathbf{B}}^v : d\tilde{\Sigma}, \quad (5.24)$$

$\tilde{\mathbf{B}}^v$ désignant le tenseur de localisation attaché au matériau linéaire de comparaison construit. Les estimations obtenues pour des polycristaux CFC sans texture, avec un comportement en loi puissance sont très proches de celle de Taylor pour de fortes non-linéarités.

Approximation sécante : formulation totale de Hutchinson. Partant de la formulation précédente, Hutchinson intègre les relations incrémentales pour des lois de comportement locale en loi puissance. Il obtient une formulation sécante dans laquelle le comportement en chaque point du polycristal est linéarisé à l'aide du module sécant $\tilde{\mathbf{m}}_s^v$ selon :

$$\dot{\tilde{\epsilon}} = \tilde{\mathbf{m}}_s^v : \tilde{\sigma}. \quad (5.25)$$

Le matériau de comparaison est toujours visqueux linéaire mais défini cette fois par ses modules sécants. La formulation n'est plus incrémentale, les réponses mécaniques instantanées peuvent être déterminées directement.

Approximation tangente : Molinari et al. En 1987, Molinari et al [Molinari *et al.*, 1987] proposent une nouvelle méthode d'estimation du comportement visqueux des polycristaux. Là encore les auteurs tentent d'estimer directement le comportement, mais le matériau de comparaison est cette fois de type « linéaire thermoélastique », autrement dit soumis à

un champ de pré-contraintes \mathfrak{G}_0 . Les prédictions obtenues se révèlent très souples pour de fortes non-linéarités. Cette approche sera reprise ultérieurement par Lebensohn et Tomé [Lebensohn et Tome, 1993] afin de lever certaines approximations.

Approximation affine. En 1998, Masson [Masson, 1998] propose une formulation viscoplastique (puis viscoélastique [Masson et Zaoui, 1999]) de l'estimation par linéarisation affine. Tout comme le modèle tangent, elle repose sur une linéarisation tangente du comportement local. Mais, elle diffère de ce dernier en faisant appel au « milieu linéaire (hétérogène) de comparaison » (MLC) introduit par Ponte-Castañeda [Ponte-Castaneda, 1996] dans son approche variationnelle (présentée très succinctement ci-après). Toutefois, la description du MLC est ici simplifiée en une représentation homogène par phase. Cette meilleure description du milieu de comparaison permet d'aborder l'estimation du comportement dans le cas de forte non-linéarité.

Il est à noter que l'estimation par linéarisation affine a donné lieu à une formulation élastoviscoplastique, proposée par Masson en 1998 [Masson, 1998]. Mais cette formulation s'avère lourde car elle nécessite, outre l'usage de la transformée de Laplace-Carson et le passage par l'espace des complexes \mathbb{C} , de conserver les histoires de toutes les variables.

En 2000, une implémentation simplifiée a été proposée dans [Brenner *et al.*, 2002]. Celle-ci présente une formulation élastoviscoplastique en chargement monotone proportionnel. L'interpolation des fonctions du temps en est grandement simplifiée.

En 2001 Brenner et al [Brenner *et al.*, 2001] donnent une extension de l'approche affine : « l'afine modifiée viscoplastique » dans laquelle les fluctuations intraphases sont prises en compte. En 2005, la formulation élastoviscoplastique avec fluctuation est proposée [Brenner et Masson, 2005].

Modèle variationnel de Ponte-Castañeda. En 1991, Ponte-Castañeda propose une nouvelle méthode de linéarisation des comportements locaux conduisant à la définition du milieu (hétérogène) linéaire de comparaison (MLC) [Ponte-Castaneda, 1991]. Cette méthode consiste à linéariser les lois de comportement non linéaires des phases constitutives du matériau considéré, conduisant à la définition d'un milieu de comparaison linéaire hétérogène, élastique ou thermoélastique. Ce dernier est donc initialement continuellement hétérogène. Il s'agit d'une prise en compte de l'hétérogénéité intraphase au premier ordre.

Modèle du second ordre de Ponte-Castañeda. Suite à l'estimation variationnelle, Ponte-Castañeda développe en 1996 [Ponte-Castaneda, 1996] la procédure du second ordre. Cette démarche est basée sur une approche énergétique. Chaque phase \mathfrak{p} est caractérisée par son potentiel $\omega^{\mathfrak{p}}$. A ce potentiel est associé un MLC thermoélastique fictif. Le potentiel effectif du matériau non linéaire étudié est obtenu en appliquant le principe de minimisation de l'énergie potentielle. La réponse globale en contrainte du matériau non linéaire est finalement estimée par la dérivée du potentiel effectif.

Ponte-Castañeda [Ponte-Castaneda, 2002a], [Ponte-Castaneda, 2002b], a proposé une seconde approche qui diffère de la première par la méthode de linéarisation employée.

5.1.5 Evaluation des modèles.

De nombreuses études visent à confronter ou évaluer les modèles. Trois méthodes sont principalement mises en œuvre :

- la confrontation aux résultats expérimentaux,
- la comparaison à des résultats numériques,
- l’analyse en regard des bornes.

Pendant longtemps, ces analyses ont été menées à l’échelle globale, *i.e.* celle du VER. Les travaux récents s’orientent d’avantage vers une échelle plus locale, c’est-à-dire soit en moyenne par phase, soit en termes de fluctuations au sein des phases (décrites par leur écart-type, voire leur fonction de distributions).

Les confrontations à l’expérience, tant à l’échelle globale que locale, sont peu nombreuses. Sont à noter dans cette thématique, les travaux de Bornert [Bornert, 1996], [Bornert *et al.*, 1993], portant sur l’analyse des fluctuations inter et intra phases de la déformation au sein d’un alliage fer / argent, et plus récemment [Rupin, 2007].

A contrario, **la confrontation aux bornes existantes**, à l’échelle globale, dispose d’une bibliographie bien plus ample. A titre d’exemple, en 1996, Gilormini [Gilormini, 1996] présente une évaluation de plusieurs extensions non linéaires viscoplastiques du modèle auto-cohérent. Il apparaît alors que ces modèles, qui coïncident dans le cas linéaire, violent fréquemment la borne supérieure, comme le montre la figure 5.3. Concernant les modèles reposant sur la définition d’un MLC, il conviendra de se reporter aux travaux de [Ponte-Castaneda, 1996] et [Ponte-Castaneda, 2002b] notamment ; ainsi que [Bornert et Ponte Castaneda, 1998] et [Nebozhyn *et al.*, 2000] pour des applications similaires sur polycristal 2D.

Concernant la comparaison à des résultats numériques, les principales analyses sont celles de Moulinec et Suquet [Moulinec et Suquet, 2003], Ponte-Castañeda et Suquet [Ponte-Castaneda et Suquet, 2001], Chaboche et Kanouté [Chaboche et Kanouté, 2003], et Rekik dont la thèse elle-même est consacrée à l’évaluation des procédures de linéarisation en homogénéisation non linéaire [Rekik *et al.*, 2007], [Rekik, 2006]. Moulinec et Suquet comparent les réponses effectives aux résultats obtenus par transformée de Fourier Rapide. Suquet et Ponte-Castañeda se placent en regard de simulations par la méthode des éléments finis obtenus par Michel *et al.* [Michel *et al.*, 1999]. Le matériau étudié est un biphasé isotrope ayant un comportement rigide parfaitement plastique. La microstructure est représentée par des cellules unitaires périodiques de symétrie globale isotrope.

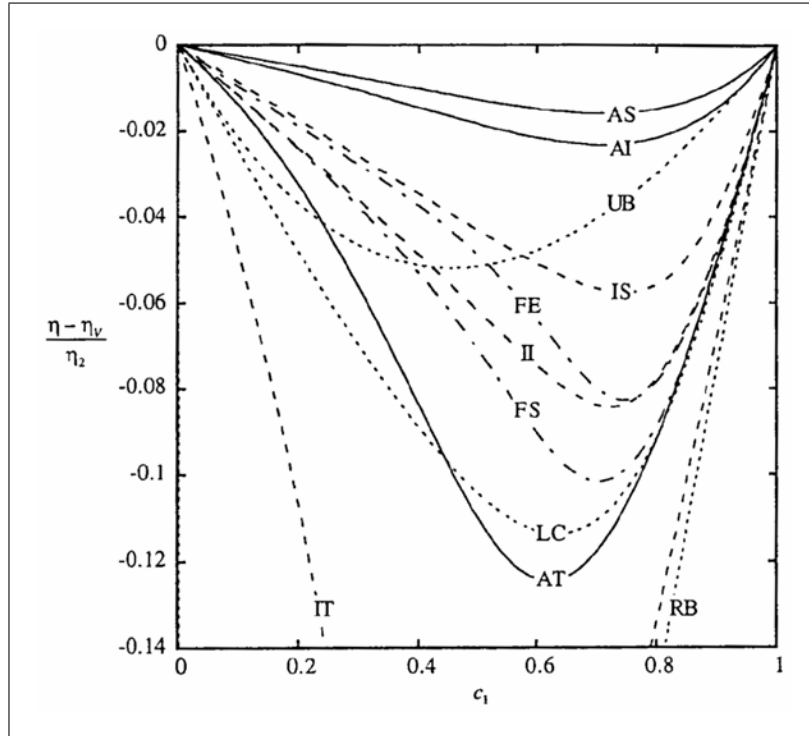


FIG. 5.3 – Prédiction pour différents modèles réalisée par Gilormini en 1996 [Gilormini, 1996] : approche anisotrope sécante (AS) et tangente (AT), isotrope sécante (IS) ou tangente (IT), utilisant un milieu linéaire de comparaison (LC) ; comparée aux bornes supérieures (UB), de type Hashin et Shtrikman non linéaire, et de Reuss (RB).

A l'échelle locale, cette méthode consiste à comparer les réponses grâce aux déformations moyennes équivalentes par phase, ou aux fluctuations isotropes et anisotropes ...

Confrontation des modèles. Ce type de comparaison, à l'échelle locale, repose sur la comparaison des hétérogénéités inter et intraphase. En 2006, Rekik [Rekik, 2006], souligne, dans son analyse préliminaire à une évaluation des procédures de linéarisation en homogénéisation non linéaire, que la méthode de confrontation *a priori* la plus rigoureuse, notamment lors d'une analyse des différentes linéarisations, consiste à confronter les modèles entre eux. En effet, il est alors possible d'adopter le même schéma d'homogénéisation linéaire. Par contre, cette méthode souffre de n'indiquer aucun élément concernant la réponse réelle du matériau, et ne permet donc pas de classer les estimations par rapport à celle-ci.

5.2 Axes privilégiés

A l'instar des derniers développements du domaine, il est envisagé ici de procéder à une analyse en moyenne par phases afin d'évaluer la capacité des modèles étudiés à représenter

correctement la distribution par phase des contraintes et des distributions.

Homogénéisation en éléments finis. L'analyse en moyenne par phase des estimations conduit à reconsidérer la définition du VER lors des approches par éléments finis. Dans quel mesure un VER, au sens de l'échelle globale, est-il représentatif en distribution de phases ? Dans le souci d'une plus grande cohérence avec les démarches en champs moyens, l'approche envisagée ici vise à s'affranchir à la fois de la notion de bord et de la singularité de l'environnement d'une phase, deux caractéristiques propres aux approches par éléments finis. Ainsi, il est proposé :

- de recourir aux conditions aux limites périodiques ;
- d'adopter une démarche statistique, dans laquelle n réalisations du même calcul sont conduites, en changeant à chaque fois l'environnement d'une phase, et en moyennant le comportement de celle-ci sur l'ensemble des calculs.

Evaluation de modèles à champs moyens. Comme indiqué précédemment, la plupart des études, tant d'un point de vue expérimental qu'en confrontation aux approches numériques, ont été menées sur des matériaux assez spécifiques tels que les biphasés. Qu'en est-il d'une description plus générale des polycristaux ?

Une confrontation entre modèles à champs moyens et calculs éléments finis périodiques est ici abordée dans le cadre d'un matériau polycristallin, de microstructure considérée morphologiquement isotrope, de structure cristallographique cubique à faces centrées, et dont la phase est définie par l'orientation cristallographique.

La loi de comportement locale, *i.e.* monocristalline, est identifiée sur courbe expérimentale. La texture cristallographique, mesurée expérimentalement par diffraction aux rayons X, est décrite dans les modèles, tant en éléments finis qu'en champs moyens.

Enfin, le chargement étudié est un cyclage traction-compression, permettant ainsi une confrontation aux deux stades clés que sont la fin de traction, et la compression.

En conclusion ...

1. *Les caractéristiques de définition du VER en éléments finis ont été établies à ce jour à l'échelle globale.*
 - *La représentation du comportement macroscopique homogénéisé peut être obtenue aussi bien à l'aide d'un volume suffisamment grand pour être statistiquement représentatif, que par une multitude de petits volumes sur lesquels les grandeurs macroscopiques sont moyennées ; résultat récemment utilisé par Kanit en élasticité linéaire [Kanit, 2003], et par Madi [Madi, 2006] en viscoplasticité. Il faut toutefois un volume assez grand et des conditions aux limites adaptées.*
 - *Le VER est défini en fixant un seuil sur le nombre de représentations nécessaires à l'approche statistique.*
 2. *L'évaluation des modèles en champs moyens a longtemps été réalisée à la seule échelle globale. Elle est de plus en plus souvent complétée par une analyse en moyenne par phase, voire en fluctuation intraphase. Les principales études disponibles à ce jour, tant en confrontation à des résultats expérimentaux [Bornert et al., 1993], [Rupin, 2007] qu'à des approches numériques [Ponte-Castaneda et Suquet, 2001], portent sur des matériaux biphasés.*
-

Chapitre 6

Evaluation numérique de modèles à champs moyens

« A partir d'une certaine récurrence, la chance n'est plus un hasard mais une qualité. »
Benoîte Groult (1920-...), *La Touche étoile*

CE CHAPITRE^{1,2} propose de confronter les estimations de trois modèles issus du schéma auto-cohérent à l'échelle du comportement moyen par phase. La méthode ici proposée prend pour référence les calculs éléments finis. Ceci implique donc tout d'abord une définition et une analyse du VER à l'échelle de la phase. Ainsi, des essais sous chargement cyclique ont été menés afin d'identifier la loi monocristalline. Ils sont tout d'abord présentés, et l'identification discutée. Puis, la notion de VER est abordée à la fois macroscopiquement et en moyenne par phase, selon une approche statistique. Enfin, les modèles à champs moyens de Kröner, Berveiller-Zaoui, et la règle en β sont confrontés aux calculs éléments finis, selon la double approche de l'échelle globale et en distribution.

¹Les résultats ici présentés ont fait l'objet d'une communication dans le cadre du 17th *International Workshop of Computational Mechanics of Materials*, Paris, août 2007 [Bouteleux et al., 2007] ; un article est en cours de soumission [Gérard et al., 2008a].

²L'initiation de ce travail a été menée dans le cadre d'un stage de maîtrise (S.Bouteleux), co-encadré avec G.Cailletaud et S.Leclercq, financé par EDF R&D, de mars à août 2007.

6.1 Définition du comportement de référence

L'objectif de ce chapitre est d'évaluer plusieurs règles de transitions d'échelles. Il est alors nécessaire de se doter d'un comportement dit de référence, auquel seront comparées les prédictions des différents modèles étudiés. Deux possibilités se présentent : soit une référence expérimentale, soit une numérique, par le biais des calculs éléments finis supposés fournir une description fiable du comportement dès lors que le VER est correctement défini.

D'un point de vue expérimental, il est pour le moins difficile d'accéder aux moyennes par phase de contrainte et déformation sur un volume. Il a donc été choisi de recourir à une référence numérique dont le comportement monocristallin est lui-même macroscopiquement identifié sur courbe expérimentale.

6.1.1 Essai macroscopique cyclique

Un essai expérimental macroscopique cyclique est effectué. La déformation est obtenue à partir du déplacement de la traverse car le montage ne permettait pas de placer un extensomètre à couteau (voir photo du montage figure 6.2), ni une jauge de déformation (voir géométrie de l'éprouvette figure 6.1). De même la contrainte est déduite de la cellule de force. Ces mesures n'étant pas de très grande précision, la courbe d'écrouissage obtenue est indicative. Elle sera néanmoins suffisante puisque les modèles à champs moyens sont évalués de façon relative.

Le matériau utilisé est décrit au chapitre 4. Nous n'en rappelons ici que les grands points. Il s'agit d'un cuivre pur laminé à chaud lors du coulage. La texture, est assez peu marquée, et présente une fibre γ (voir annexe C pour la mesure de texture par diffraction aux rayons X). Avant essai, un pré laminage à froid, de taux de réduction $\Delta\epsilon = 0,7$, est effectué (soit une déformation plastique résiduelle de 4,5%).

Le chargement étudié est un cyclage traction-compression, en déformation imposée. Son amplitude est de 1% de déformation totale, avec valeur moyenne nulle. La fréquence de cyclage est de 0,083 Hz. L'essai a été réalisé sur une machine de traction-compression de type MTS avec contrôleur Testar 2S, d'une capacité statique de 100 kN, avec un groupe hydraulique de 20 l.min⁻¹. L'éprouvette utilisée est identique à celle de l'essai cyclique *in situ*. Ses dimensions sont rappelées sur la figure 6.1.

6.1.2 Identification des paramètres de la loi monocristalline

Le comportement monocristallin est décrit à l'aide de la loi phénoménologique de Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991]. Les relations sont rappelées dans le tableau 6.1.

Le chargement utilisé ne permet pas d'identifier pleinement les paramètres de viscosité, ni la

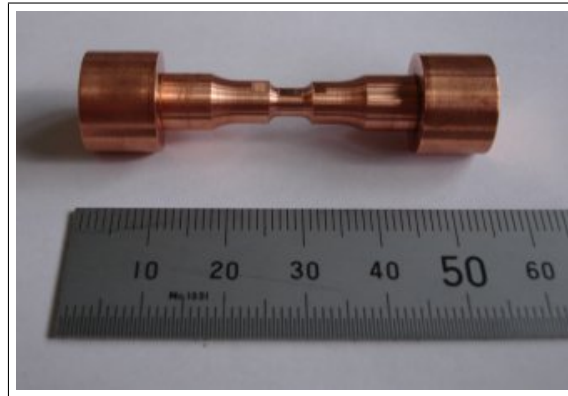


FIG. 6.1 – Epreuve de traction-compression. La double zone utile permet d'éviter le flambement tout en gardant un diamètre des têtes et une longueur globale compatible avec le montage.



FIG. 6.2 – Essai cyclique de traction-compression sur machine de type MTS avec contrôleur Testar 2S, d'une capacité statique de 100 kN, avec un groupe hydraulique de 20 l.min^{-1} .

matrice d'interaction. En conséquence, la matrice d'interaction est prise égale à celle obtenue au chapitre 2 ; et les paramètres de viscosité sont ajustés au mieux à partir des valeurs du chapitre 2. Pour des questions de temps de calcul éléments finis, l'étude porte sur le premier cycle.

L'identification est réalisée à l'aide de la règle en β sur le cycle complet, et contrôlée avec le modèle de Berveiller-Zaoui sur la traction (à l'instar de la démarche présentée au chapitre 2). Le jeu de coefficients obtenu est reporté au tableau 6.2, et la courbe d'écrouissage présentée à la figure 6.3.

L'élasticité décrite ici est isotrope linéaire : le modèle de Berveiller-Zaoui le requiert, et cela permet de ne pas introduire une instabilité supplémentaire. Là encore, dans la présente confrontation ce choix technique est sans impact sur l'issue de la confrontation puisque celle-ci est relative.

Les paramètres de viscosité sont relativement semblables à ceux présentés au chapitre 2. Enfin, la description de l'écrouissage est quelque peu différente. La description d'un chargement cyclique impose l'existence d'un écrouissage cinématique. De plus, les traitements thermomécaniques initiaux appliqués sur le matériau sont sensiblement différents de ceux du cuivre utilisé au chapitre 2. En conséquence, la limite d'élasticité, et la saturation de l'écrouissage sont sensiblement modifiées.

Ecoulement viscoplastique	$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{\ \tau^s - x^s\ - r^s}{K} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - x^s)$
Ecrouissage cinématique	$x^s = c\alpha^s \quad \text{et} \quad \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\dot{v}^s\alpha^s$
Ecrouissage isotrope	$r^s = R_0 + Q \sum_r h^{sr} \{1 - \exp(-Bv^r)\}$

TAB. 6.1 – Loi monocristalline Méric-Cailletaud. L'écoulement $\dot{\gamma}^s$ est de type Norton viscoplastique à seuil. L'écrouissage cinématique non linéaire x^s est décrit à l'aide d'une variable interne α^s . L'écrouissage isotrope r^s dépend d'une capacité de durcissement Q et d'une matrice d'écrouissage h^{sr} décrivant les interactions entre systèmes de glissement. Cette loi est dite phénoménologique cristalline [Méric et Cailletaud, 1991].

viscosité		écr. isotrope			écr. cinématique		matrice d'écrouissage					
K (MPa.s ^{1/n})	n	R_0 (MPa)	Q (MPa)	B	c (MPa)	d	h_0	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
8	20	15	4	12	32000	900	1	1	0,2	90	3	2,5

TAB. 6.2 – Coefficients de la loi monocristalline phénoménologique Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991] identifiés sur courbe expérimentale de chargement cyclique traction-compression.

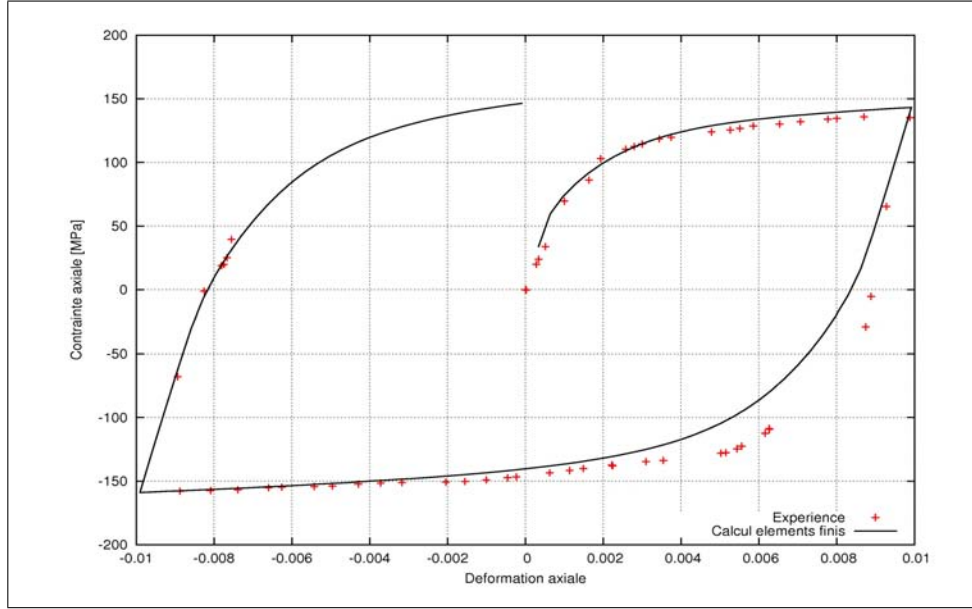


FIG. 6.3 – Courbe d’identification, par calculs éléments finis périodiques (voir chapitre 2 pour la méthode), de la loi monocristalline Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991].

6.1.3 Mise en œuvre des calculs éléments finis

Microstructure, maillage, chargement

L’ensemble des calculs éléments finis présentés dans ce chapitre, qu’il s’agisse de l’identification, ou par la suite, de l’analyse statistique de la définition du VER, ont été réalisés de façon semblable à ceux du chapitre 2. Ainsi, la microstructure utilisée est périodique, et composée de polyèdres de Voronoï non tronqués (voir figure 6.4). Le maillage est tri-dimensionnel, libre, et respecte les joints de grains. Les calculs sont effectués en parallèle, sur le cluster du Centre des Matériaux¹, après découpage du maillage en sous-domaines respectant les joints de grains (*i.e.* arêtes de polyèdres). La figure 6.4 rappelle les principales caractéristiques de la microstructure.

La diagonale du tenseur de déformation est imposée selon une table de chargement issue des simulations par la règle en β (*cf.* chapitre 2 pour la justification du procédé). Les composantes non diagonales sont prises nulles.

La microstructure comprend 200 grains, ce qui permet une bonne description de la texture, comme le montre la confrontation des figures de pôles expérimentales et discrètes présentée à la figure 6.5. La texture elle-même est analysée plus en détail à l’annexe C.

¹La grappe utilisée comporte 112 nœuds de calculs composés chacun d’un biprocesseur 64bits Opteron 248 cadencé à 2,2 GHz. 30 nœuds sont dotés de 4 Go de mémoire vive, 74 nœuds ont 8 Go de mémoire vive, et 4 en ont 16 Go. Le réseau ethernet dédié au calcul est Gigabit. Chaque sous-domaine représente environ 2,3Go de mémoire vive utilisée lors du calcul.

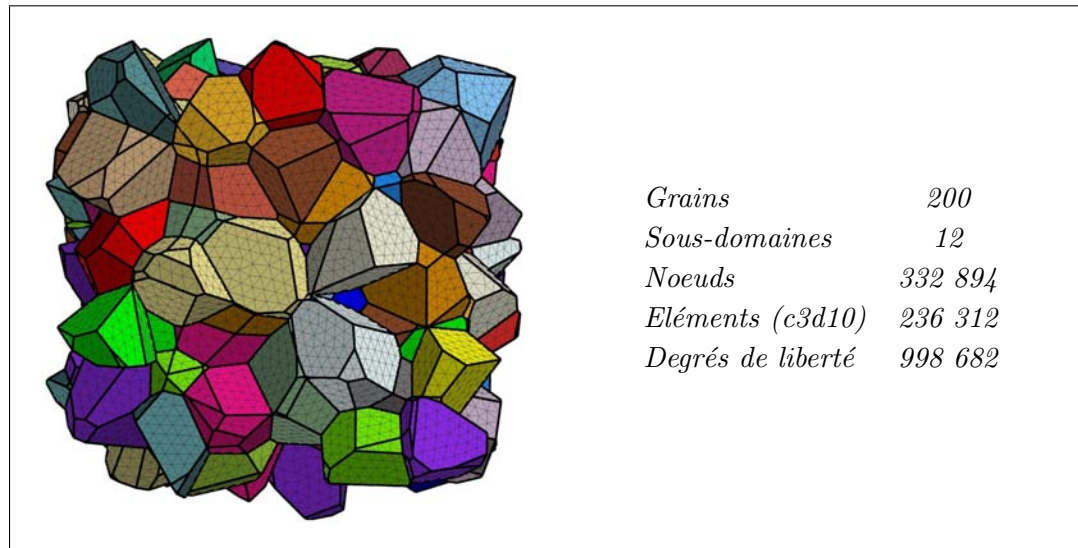


FIG. 6.4 – Maillage tri-dimensionnel périodique utilisé pour la validation de l'identification par calcul éléments finis. La géométrie est composée de polyèdres de Voronoï non coupés. Le maillage respecte les joints de grains. Les éléments utilisés (c3d10) sont tétraédriques quadratiques.

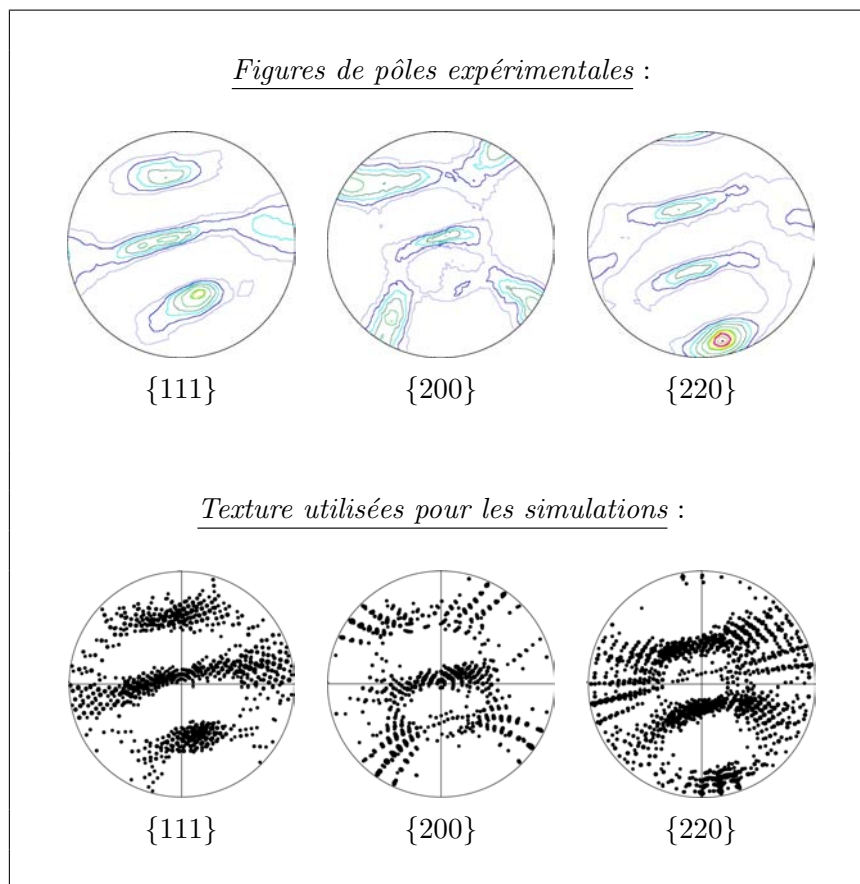


FIG. 6.5 – Figures de pôles des textures expérimentale et discrète.

Calcul de la contrainte en éléments finis : impact de la pression hydrostatique

Les artefacts dus à la variation spatiale de la partie hydrostatique des contraintes constituent un problème connu en modélisation par éléments finis [Tanguy, 2001], [Mathieu, 2006], [Osipov, 2007]. La trace du tenseur des contraintes est en effet mal définie par l'approche variationnelle lorsque la proportion de déformation plastique (isochore) augmente. L'importance de cette variation dépend de l'amplitude du chargement, c'est pourquoi elle est essentiellement corrigée dans le cadre d'études en grandes déformations. Pour autant, il est intéressant de constater ici (voir figure 6.6) que même en étude de plasticité à faible déformation, l'impact sur les *extrema* est loin d'être négligeable.

Nous avons appliqué ici, en post-traitement, une correction classique qui consiste à remplacer, sur chaque point de Gauss, la valeur locale de la pression hydrostatique p par sa moyenne \bar{p} sur l'élément, comme le montre l'équation 6.1.

$$\underline{\sigma}^* = \underline{\sigma} + \mathbf{I}(\bar{p} - p) \quad \text{avec} \quad p = \frac{\text{Tr}(\underline{\sigma})}{3}. \quad (6.1)$$

La figure 6.6 montre la distribution de la contrainte axiale ainsi que ses *extrema* avec et sans correction. Il faut noter toutefois que la procédure de calcul de moyennes par phases que nous appliquerons dans la suite contient de façon implicite cette correction, puisque le maillage respecte les joints de grains.

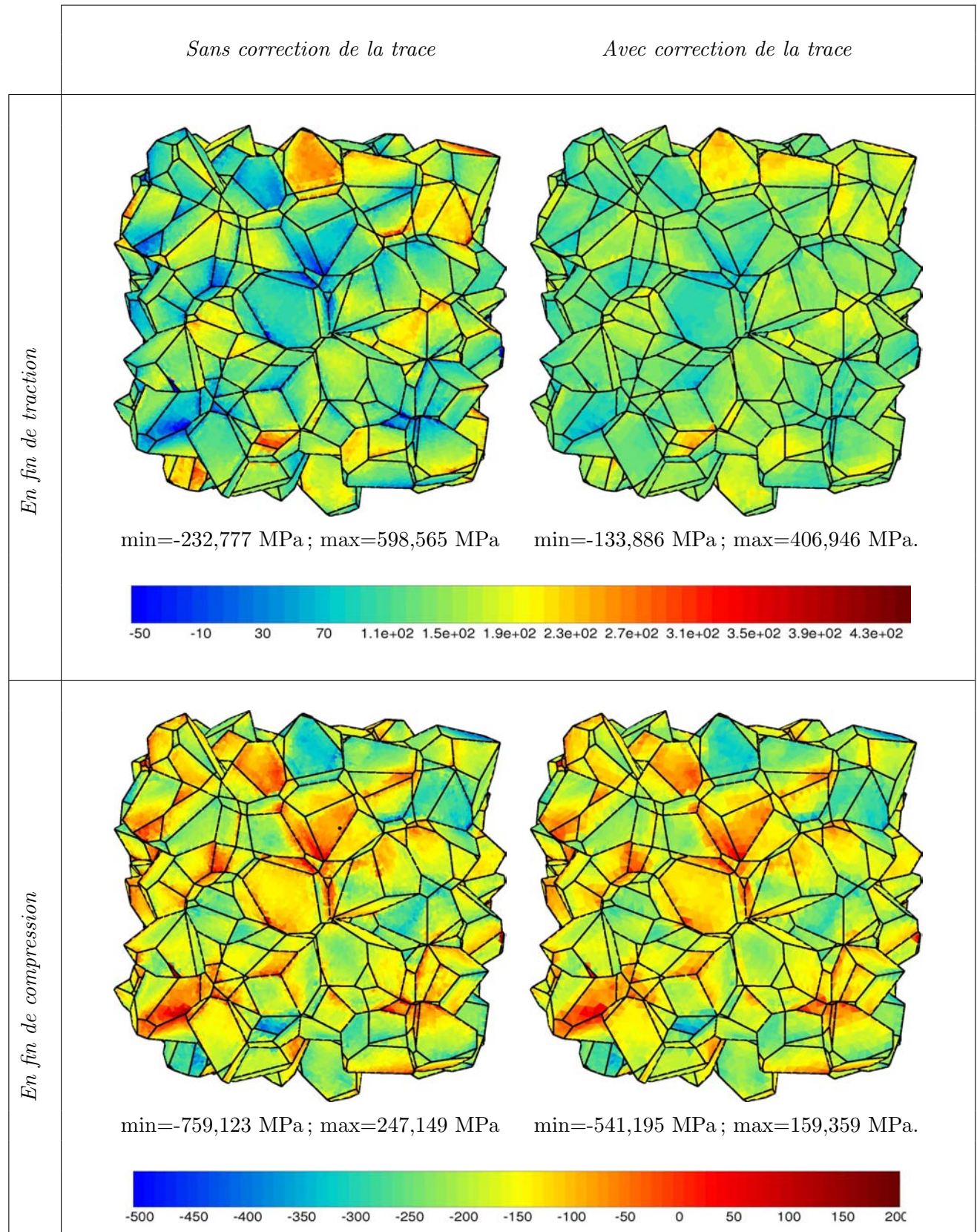


FIG. 6.6 – Distribution de la contrainte axiale : sans et avec correction de la trace du tenseur des contraintes.

6.2 Description VER en calculs éléments finis

Comme indiqué au chapitre précédent (chapitre 5), Kanit a montré que, sous certaines conditions minimales de taille de l'agrégat, la notion de VER pouvait être abordée selon une approche statistique. En conséquence, 50 réalisations du même calcul – entendons ici par réalisation : affectation différente du même jeu d'orientations cristallographiques sur un même maillage – ont été conduites ².

6.2.1 Analyse à l'échelle globale

La première analyse menée sur le VER se situe à l'échelle macroscopique. La figure 6.7 présente la distribution des courbes d'écrouissage en traction pour 50 réalisations. La dispersion en contrainte axiale, à 1% de déformation, est de 2,69 MPa.

Kanit [Kanit, 2003], puis Madi [Madi, 2006] ont défini le critère (6.2) comme seuil de validité d'une approche statistique du VER.

$$\frac{D(Z)}{\sqrt{n}\bar{Z}} \leq 1\%, \quad (6.2)$$

où Z est la grandeur de référence (le VER se définit par rapport à une grandeur donnée, cf. chapitre 5), $D(Z)$ l'écart-type associé à la distribution de la grandeur Z , n le nombre de réalisations, et \bar{Z} la valeur moyenne de Z .

En étendant ici ce critère au cas élastoplastique, l'application à notre calcul donne une valeur de 0,9% pour les 2 réalisations extrémales parmi les 50 effectuées.

La figure 6.12 présente également les courbes d'écrouissage obtenues, sur l'ensemble du cycle, après moyenne des déformations et contraintes macroscopiques sur, respectivement, 2, 3, 5, 10, 20, 30 et 40 réalisations. L'évolution observée est clairement négligeable au-delà de 2 réalisations.

Il apparaît raisonnable de considérer que 3 réalisations suffisent à définir le VER pour la contrainte, à l'échelle globale.

6.2.2 Analyse en moyenne par phase

Tout d'abord, les contrainte et déformation axiales sont moyennées par orientation cristallographique au sein de chaque réalisation.

La notion de description statistique du VER permet ensuite de définir le comportement associé

²L'aboutissement d'un calcul, après optimisation de la mise en données, représente 14h de calcul, hors le temps de collecte des différents fichiers de résultats générés par le calcul parallèle et le dépouillement. Les calculs ont été conduits sous la forme de 5 séries successives, comportant chacune 10 calculs parallèles fonctionnant simultanément.

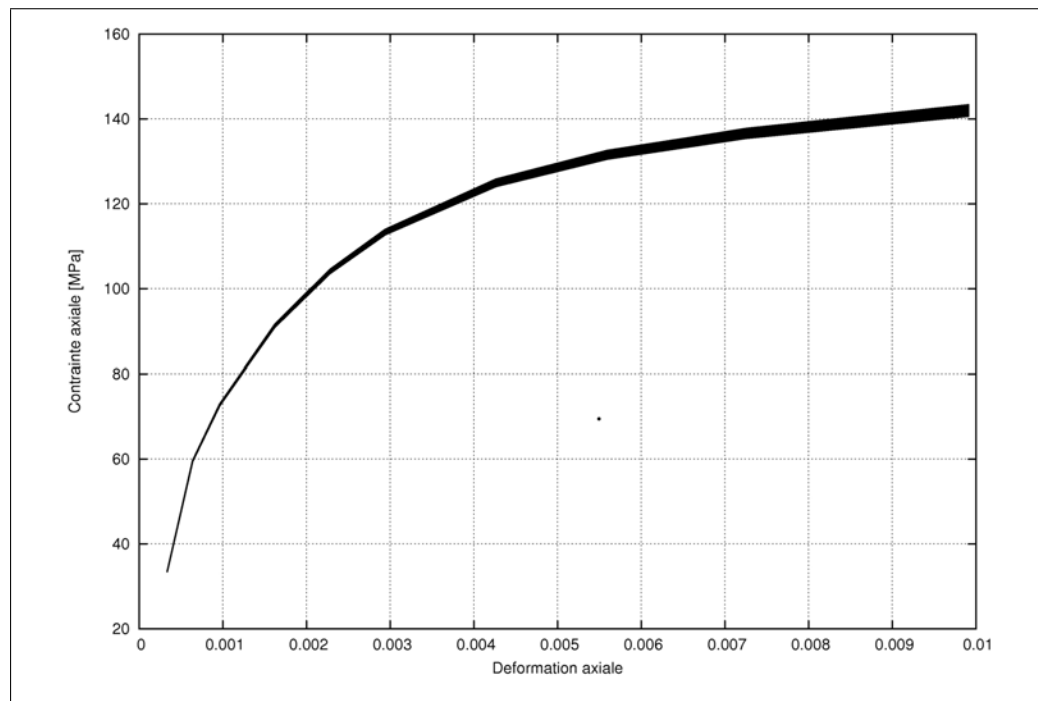


FIG. 6.7 – Dispersion des courbes d'érouissage en traction pour 40 réalisations différentes.

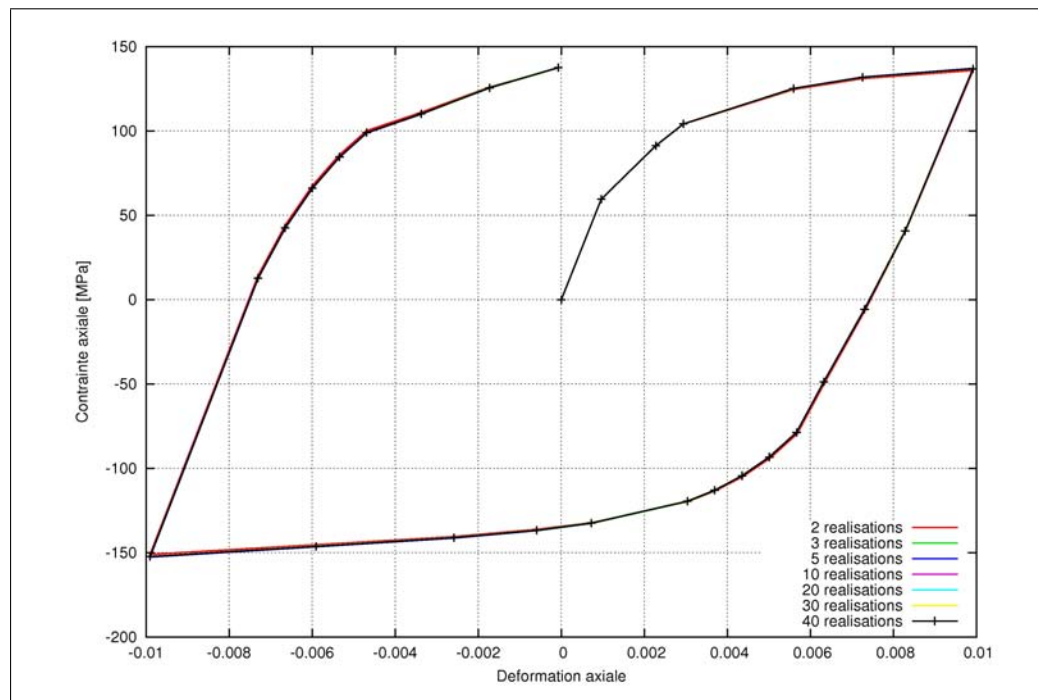


FIG. 6.8 – Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la distribution des contraintes en moyenne par phase.

	n	$E(\sigma_{axiale})$	$\bar{\sigma}(\sigma_{axiale})$	$\bar{\epsilon}$
σ_{φ}	2	141.259	0.132286	0.00066219
	3	141.757	0.712416	0.00290154
	5	142.155	0.823001	0.00258913
	10	142.039	0.765521	0.00170431
	20	142.101	0.726127	0.00114262
	30	142.091	0.713396	0.00091665
	40	142.356	0.775174	0.000860981
	50	142.387	0.761507	0.000756343

TAB. 6.3 – Application du critère (6.2) à 2, 3, 5, 10, 20, 30, 40 et 50 réalisations prises au hasard parmi les 50 calculs effectués.

à une orientation cristallographique dans un environnement moyen. Pour cela, la contrainte axiale, respectivement déformation axiale, d'une phase donnée est moyennée au travers de n réalisations. Rappelons que la réalisation est définie par la distribution spatiale des phases, autrement dit l'environnement direct de chacune des phases.

Cette démarche est appliquée pour des valeurs de n allant de 1 à 50. La figure 6.9 (respectivement 6.10) présente pour chaque valeur de n , portée en abscisse, la distribution de contrainte axiale (respectivement déformation axiale) par phase, en ordonnée.

Il apparaît alors clairement que :

- la dispersion des contraintes et déformations moyennes par phase est grande pour un faible nombre de réalisations, puis tend à se stabiliser vers une dispersion moyenne à partir d'un certain seuil ;
- ce seuil n'est manifestement pas le même en contrainte et en déformation ;
- la valeur $n = 3$, qui permettait de décrire le VER à l'échelle globale, est manifestement très insuffisante pour décrire l'environnement moyen des phases, et donc avoir une dispersion stabilisée des grandeurs par phase.

Nous pouvons considérer qu'il y a convergence de la taille de la distribution en contrainte pour 20 réalisations, et 30 réalisations en déformation.

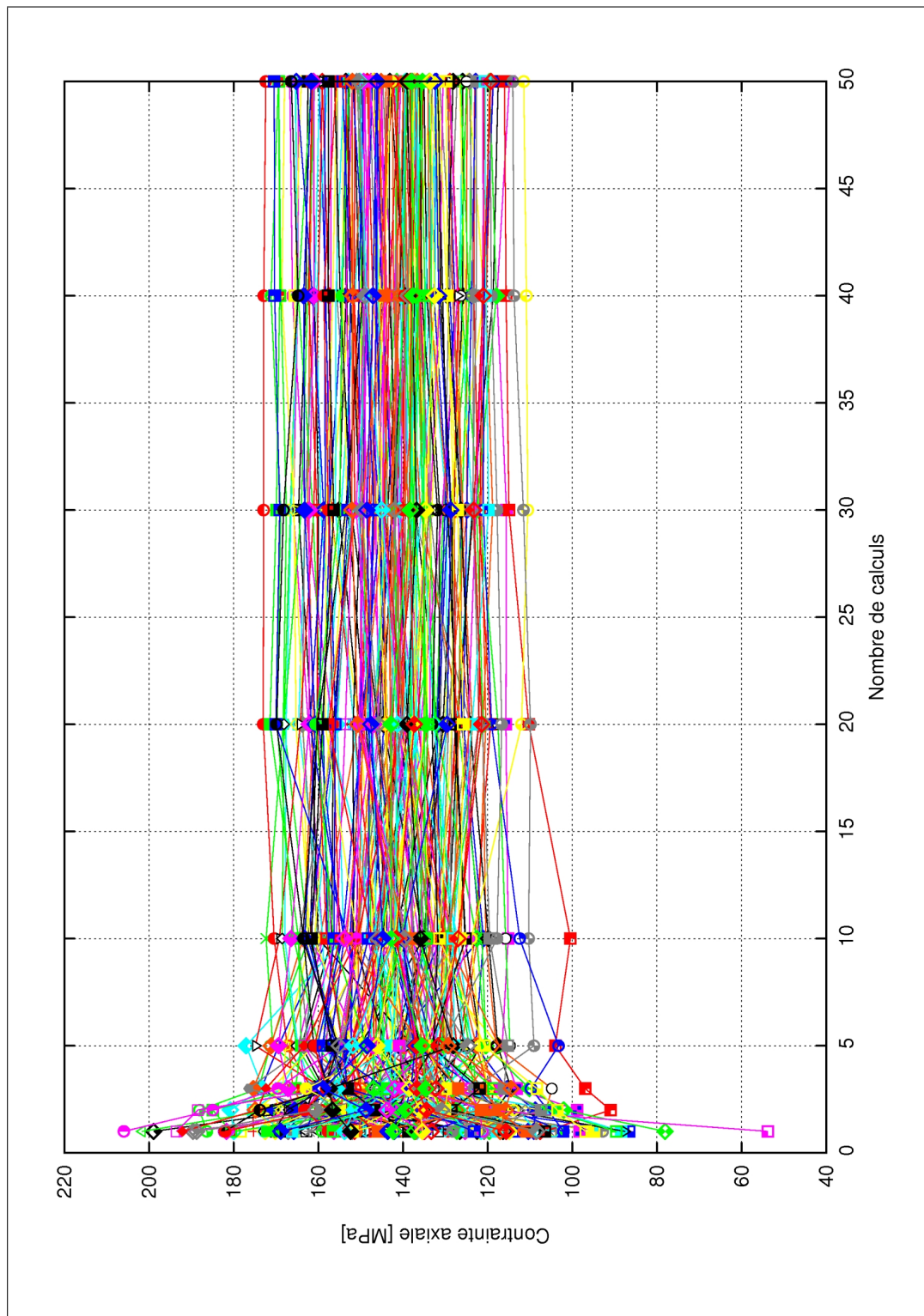


FIG. 6.9 – Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la distribution des contraintes en moyenne par phase.

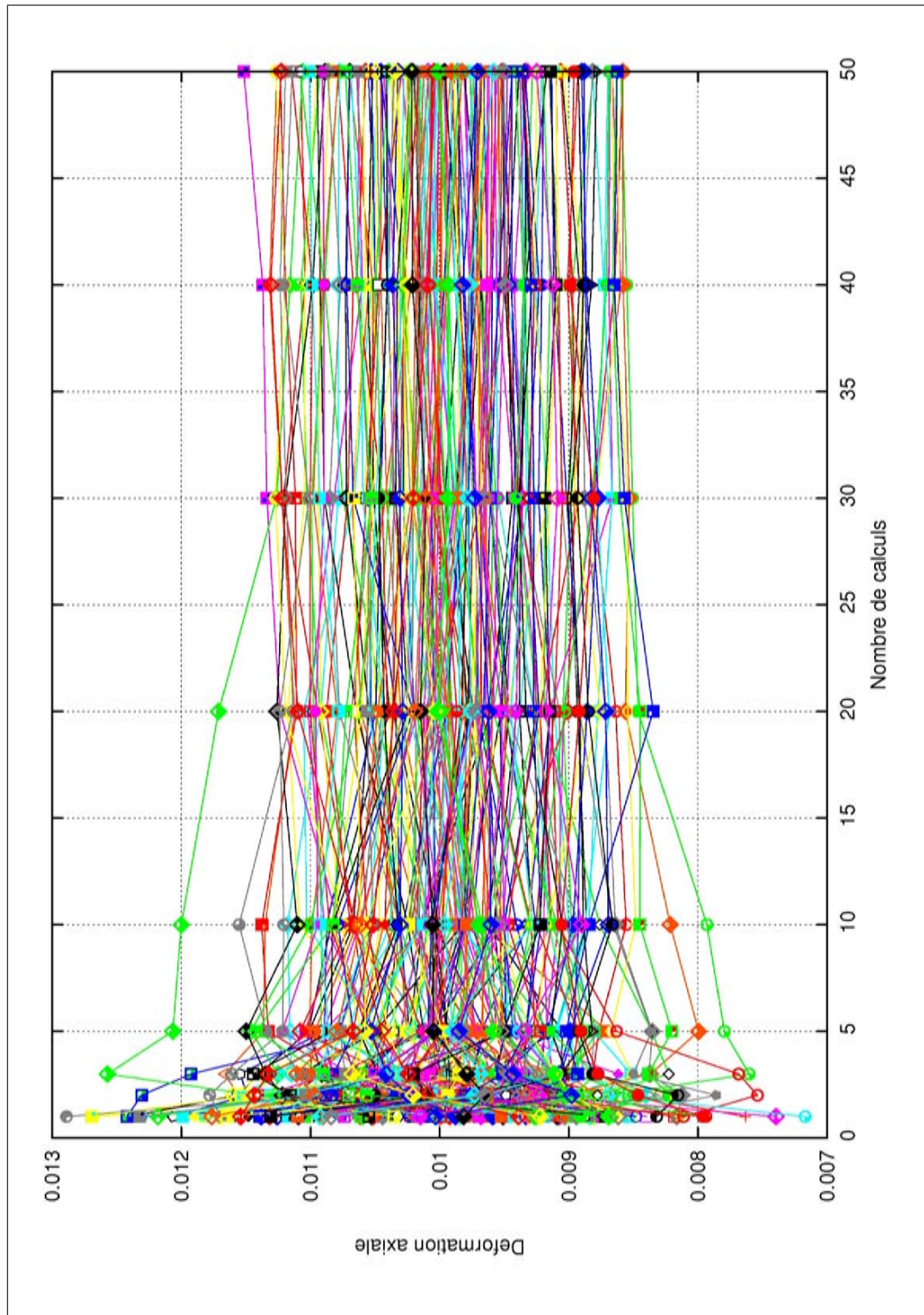


FIG. 6.10 – Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la distribution des déformations en moyenne par phase.

6.2.3 Analyse locale

L'application du critère (6.2) non plus à l'échelle macroscopique mais cette fois-ci au comportement de la phase permet d'évaluer la représentativité de l'estimation du comportement moyenné sur la phase. La figure 6.11 montre l'évolution des valeurs obtenues pour ce critère en fonction du nombre de réalisations servant à l'estimation statistique du comportement.

Les valeurs du critère obtenues pour deux ou trois réalisations montrent clairement que l'impact de l'environnement direct est si élevé, pour un faible nombre de réalisations, que l'estimation locale du comportement peut être considérée comme statistiquement erronée. Rappelons par ailleurs que trois réalisations sont suffisantes pour obtenir un comportement macroscopiquement représentatif.

Les valeurs maximales du critère obtenues respectivement pour 20 et 30 réalisations sont de 1,436 et de 1,047. La définition statistique du VER n'est pas atteinte à l'échelle locale, alors même qu'elle semble l'être en termes de distribution.

Enfin, il apparaît que les valeurs de ce critère varient finalement assez peu entre 40 et 50 réalisations. Pour autant celles-ci convergent vers une valeur comprise, suivant les phases, entre 0,22 et 0,77, ce qui reste très élevé. Si le critère employé est considéré approprié pour l'évaluation statique du comportement d'une phase, ce qui semble *a priori* raisonnable, il convient alors de s'interroger sur la taille de la microstructure. Une microstructure de 200 grains est-elle suffisante pour espérer obtenir une bonne définition du VER par approche statistique ? Il conviendrait de mener la même étude sur une microstructure sensiblement plus grosse (1 000 grains ?) et de confronter l'asymptote de convergence obtenue.

6.3 Analyse de modèles à champs moyens

6.3.1 Rappel des modèles étudiés

Les trois modèles analysés ici sont issus d'un schéma auto-cohérent, et adoptent une solution du type de celle d'Eshelby. Ils reposent sur la description d'un milieu infini ayant les propriétés effectives du polycristal, avec une inclusion obéissant à la loi de comportement local.

Le modèle de Kröner n'introduit qu'une interaction élastique entre phases, ce qui conduit généralement à une surestimation du comportement à l'échelle globale. Le modèle de Berveiller-Zaoui prend en compte l'accommodation élastoplastique dans les relations d'interaction, et permet ainsi une bonne prédiction du comportement à l'échelle macroscopique, mais est limité au cas des inclusions sphériques, avec élasticité isotrope, et chargements monotones radiaux. La règle en β reformule la relation d'interaction au moyen de variables d'accommodation phénoménologique β^ϕ dont l'évolution au cours du chargement est non linéaire. Cette loi peut être identifiée de telle sorte qu'elle donne une description macroscopique du comportement similaire à celle du modèle Berveiller-Zaoui, mais présente l'avantage d'étendre le champ d'étude

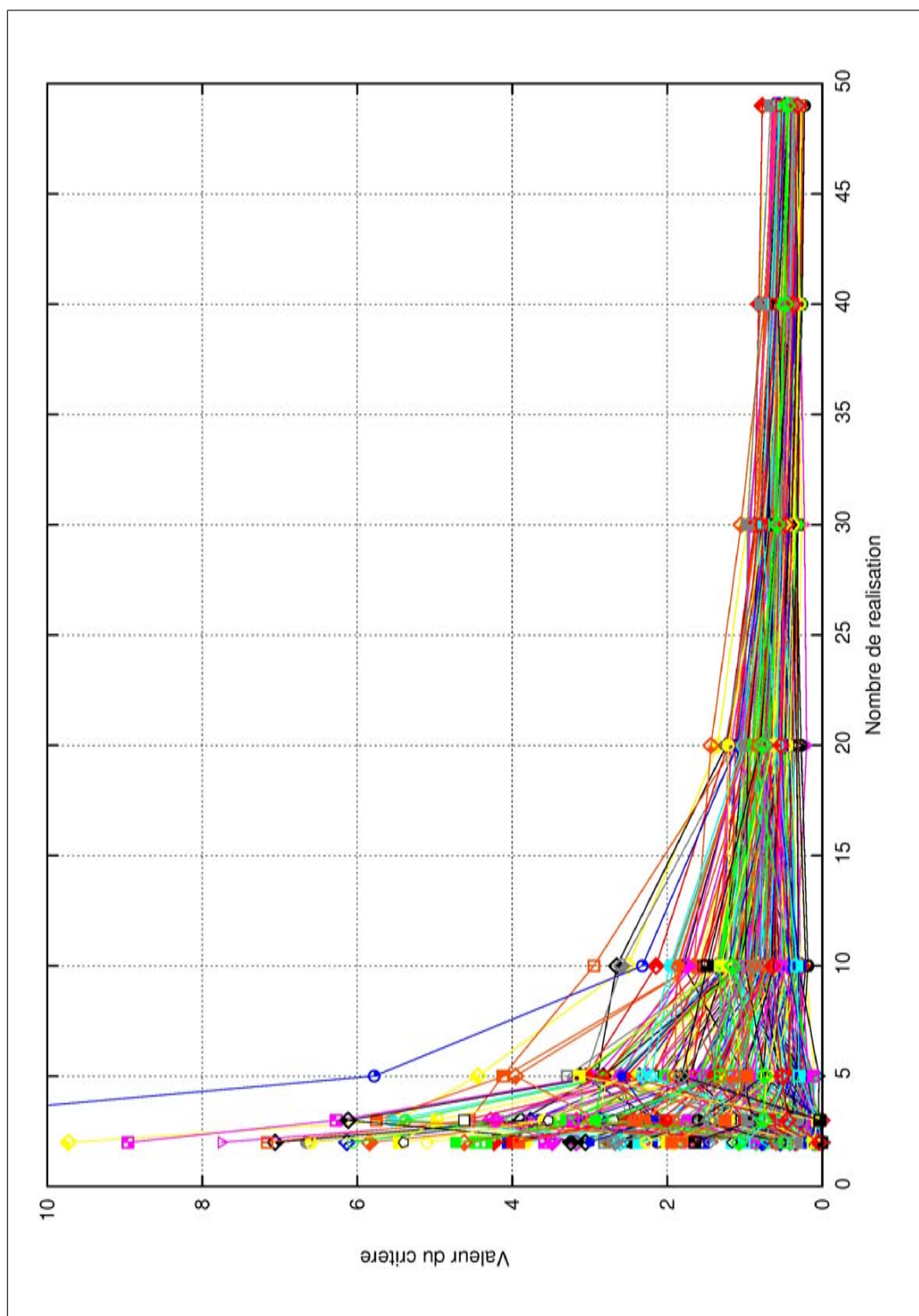


FIG. 6.11 – Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la validité de la prédiction du comportement de chaque phase.

aux chargements non-proportionnels.

L'analyse de ces modèles est ici effectuée par confrontation aux calculs éléments finis dont la microstructure a été présentée au paragraphe 6.1.3. Au vu de la géométrie des polyèdres de Voronoï et de la microstructure ainsi obtenue, il apparaît raisonnable d'assimiler la géométrie des phases à des sphères.

Les relations décrivant les trois lois d'interaction, avec l'hypothèse de géométrie sphérique, sont rappelées au tableau 6.4.

Modèle de Kröner	$\underline{\sigma}_g = \underline{\Sigma} + \underline{\mathbf{C}} : (\underline{\mathbf{I}} - \underline{\mathbf{S}}) : (\underline{\mathbf{E}}_p - \underline{\xi}_p^g)$
Modèle de Berveiller-Zaoui	$\underline{\sigma}_g = \underline{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\underline{\mathbf{E}}_p - \underline{\xi}_p^g)$ avec $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$ et $\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{E_{\Sigma}^{Mises}}{E_{\Sigma}^{Mises}}$
Règle en β	$\underline{\sigma}^g = \underline{\Sigma} + 2\mu(1 - \beta) (\underline{\mathbf{B}} - \underline{\beta}^g)$ avec $\underline{\mathbf{B}} = \langle \underline{\beta}^g \rangle$ et $\dot{\underline{\beta}}^g = \dot{\underline{\xi}}_p^g - D(\underline{\beta}^g - \underline{\delta}_{\xi_p^g}) \dot{\underline{\xi}}_p^g $

TAB. 6.4 – Formulation des lois d'interaction étudiées [Kröner, 1961], [Berveiller et Zaoui, 1979], [Pilvin et Cailletaud, 1990].

6.3.2 Procédure

La loi de comportement locale utilisée est la même que celle des calculs éléments finis. Le comportement décrit par les calculs éléments finis moyennés sur 50 réalisations, est pris comme référence. Compte tenu de l'analyse menée ci-dessus, il est considéré que la description obtenue est représentative macroscopiquement et en distribution de phases. L'estimation à l'échelle locale est, nous l'avons montré, entachée d'une erreur un peu plus grande, mais pas aberrante car il y a, à ce stade, convergence du critère ; l'analyse sera donc également menée à cette échelle.

6.3.3 Résultats et analyse

6.3.4 Echelle macroscopique

Le modèle de Berveiller-Zaoui (BZ) et la règle en β donnent toutes deux de bonnes estimations du comportement (le modèle BZ se limitant à la traction), avec toutefois une légère sous-estimation du comportement avec le BZ. L'estimation fournie par le modèle de Kröner

est trop raide, ce qui est cohérent avec les données bibliographiques. La figure 6.12 présente les courbes d'écrouissage obtenues.

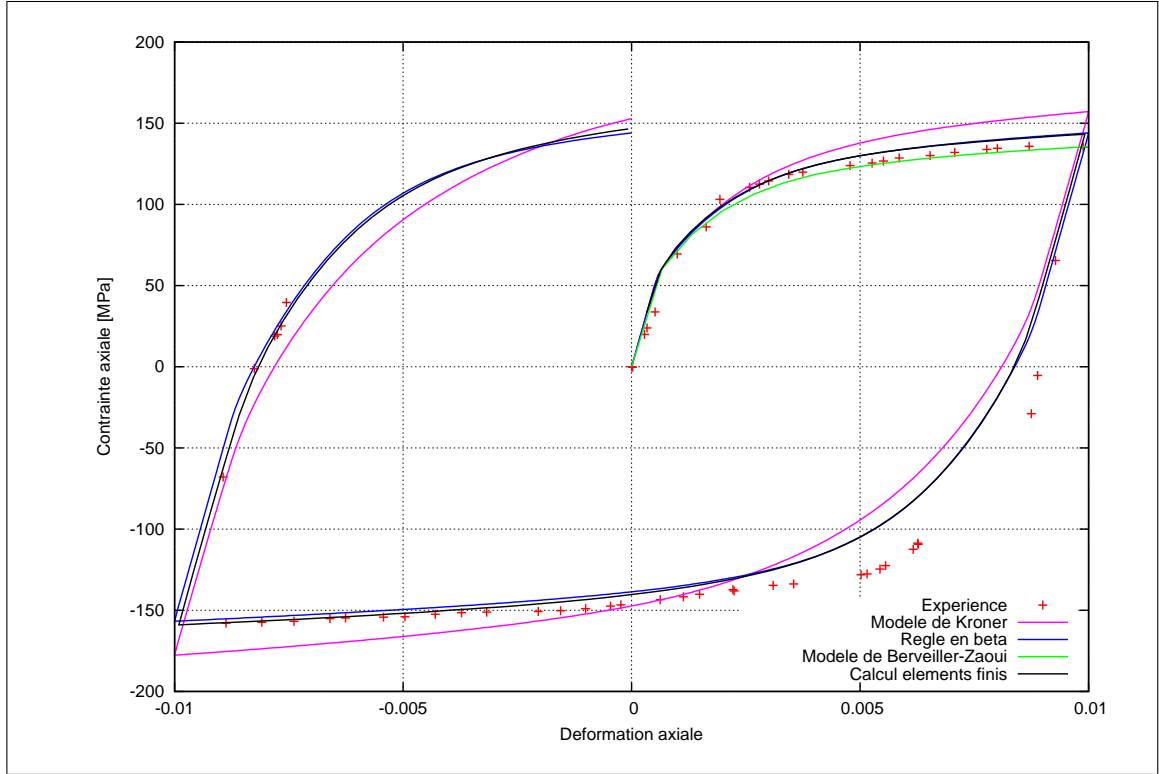


FIG. 6.12 – Confrontation des courbes d'écrouissage obtenues macroscopiquement pour différentes transition d'échelles, sur un cycle complet avec la loi monocristalline phénoménologique cristalline de Méric et Cailletaud.

6.3.5 Echelle locale

L'analyse du comportement local est effectuée en deux points du chargement : en fin de traction, et en fin de compression, soit respectivement, pour +1% et -1% de déformation axiale macroscopique imposée.

Avant toute analyse, il convient de rappeler que l'analyse en moyenne par phase est ici indépendante de toute identification puisque les deux paramètres de la règle en β nécessitant identification ont été définis à l'échelle macroscopique.

Confrontation en contrainte axiale. Les résultats obtenus (voir figure 6.13) font apparaître une très bonne estimation de la contrainte par phase avec la règle en β . Le modèle de Berveiller-Zaoui sous-estime légèrement tandis que celui de Kröner le surestime largement. Ces résultats sont cohérents avec ceux obtenus à l'échelle macroscopique.

Confrontation en déformation axiale. L'estimation de la déformation moyenne par phase est présentée à la figure 6.14. Le modèle de Kröner présente une distribution quasi-uniforme, autour de la valeur macroscopique. Le résultat obtenu était donc attendu, il confirme que le modèle diffère peu du modèle de Taylor.

Le modèle de Berveiller-Zaoui donne une bonne estimation de la déformation par phase.

Concernant la règle en β , la distribution de la déformation moyenne par phase est trop étalée.

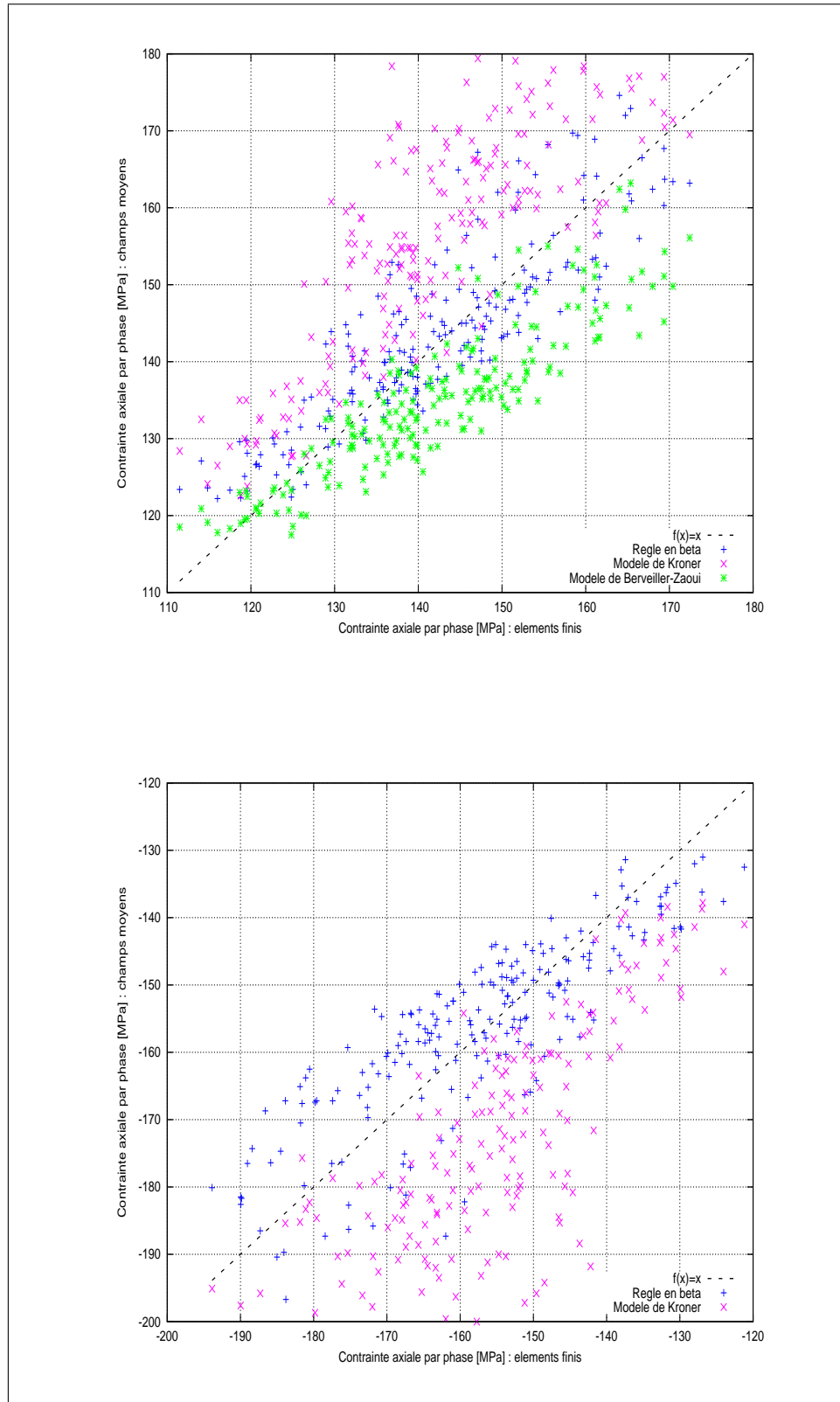


FIG. 6.13 – Distribution des contraintes axiales selon le stade de chargement (traction ou compression).

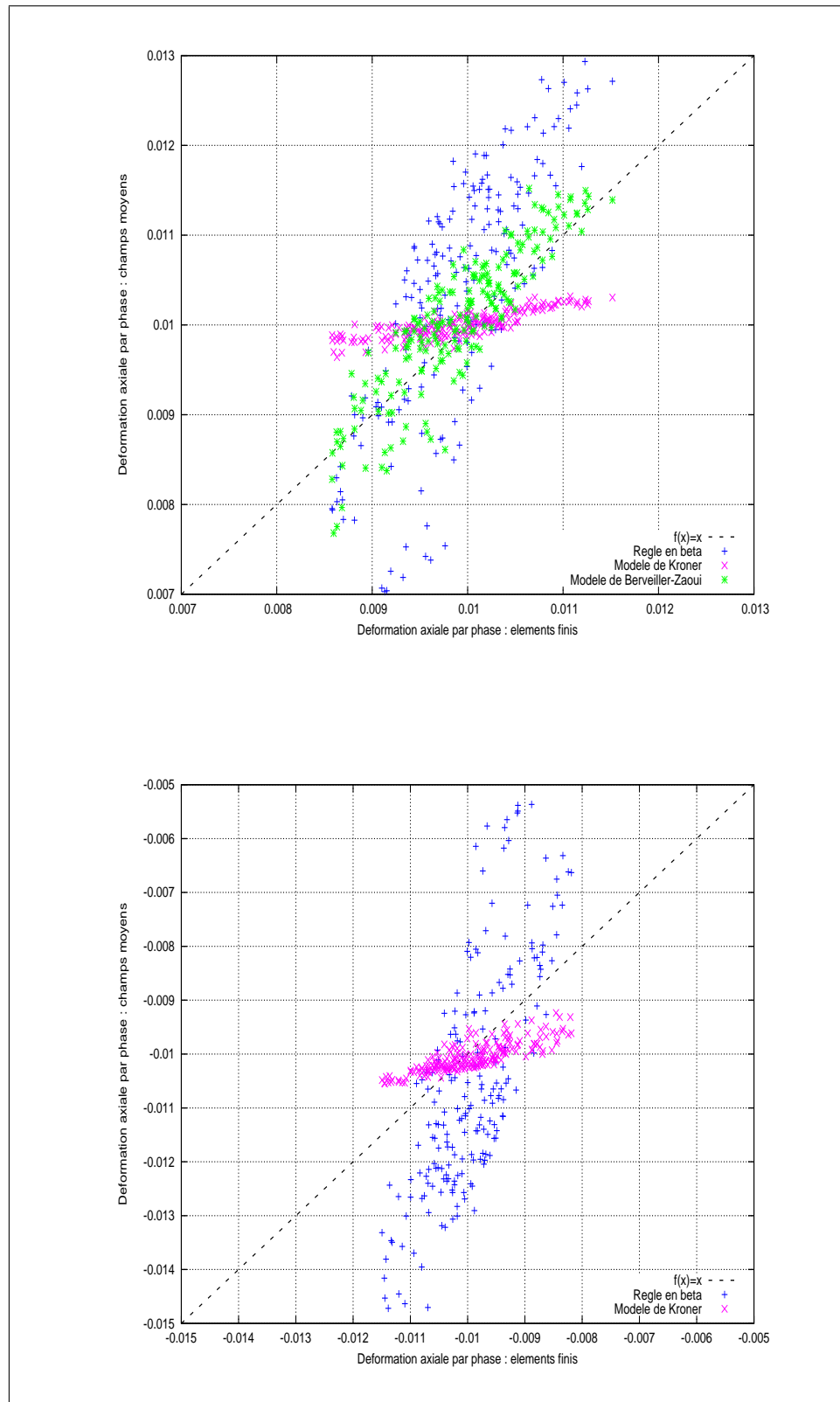


FIG. 6.14 – Distribution des déformations totales axiales selon le stade de chargement (traction ou compression).

En conclusion ...

1. Définition du VER en calcul éléments finis.

- *Le nombre de réalisations nécessaires à une bonne description statistique de la distribution du comportement en moyenne par phase est bien supérieur à celui requis pour l'échelle macroscopique (10 fois plus de réalisations dans le cas ici étudié).*
- *A l'échelle locale (estimation du comportement de chaque phase), le critère d'évaluation appliqué aux 200 phases converge vers une même asymptote pour 50 réalisations. Pour autant, l'erreur potentielle pose la question de la taille de la microstructure. Celle-ci est suffisante pour décrire le comportement macroscopique en trois réalisations mais pas nécessairement à l'échelle locale. Une étude complémentaire est nécessaire.*

2. Evaluation numérique de trois modèles en champs moyens élastoplastiques.

- *La description du comportement à l'échelle macroscopique est conforme aux attentes : le modèle de Kröner surestime le comportement, tandis que le modèle de Berveiller-Zaoui (en traction), et la règle en β fournissent une bonne estimation du comportement.*
 - *La dispersion des contraintes axiales moyennes par phase, en traction et en compression, est très bien estimée par le modèle en β , très largement surestimée par le modèle de Kröner, légèrement sous-estimée par le modèle de Berveiller-Zaoui (en traction).*
 - *La dispersion des déformations axiales moyennes par phase est très bien estimée par le modèle de Berveiller-Zaoui en traction. Le modèle de Kröner présente une distribution proche de l'uniformité, tandis que celle de la règle en β est trop étalée.*
-

Conclusions Générales et Perspectives

Conclusions générales et perspectives

« Quod non insulse scribis tetrasticha quaedam,
Disticha quod belle pauca, Sabelle, facis,
Laudo, nec admiror. Facile est epigrammata belle
Scribere, sed librum scribere difficile est. »³
Martial, *Épigrammes*, Livre VIII. lxxxv

Rappelons tout d’abord que l’ensemble de ce travail se situe dans le cadre de la plasticité cristalline, à faible déformation, pour des structures cristallographiques de type cubique à faces centrées. Les applications ont été effectuées avec deux tôles de cuivre OFHC.

Le travail effectué

L’objectif de ce travail était de développer une démarche *multi-échelles* MULTI-APPROCHES, afin de bénéficier d’un enrichissement global par la complémentarité et la confrontation des résultats. Nous nous sommes donc efforcés sans cesse de faire dialoguer au mieux les approches expérimentales et numériques (calculs par éléments finis et modèles à champs moyens). Cet effort a permis un regard novateur sur plusieurs questions récurrentes de plasticité cristalline :

- l’identification de paramètres de lois de comportement ;
- l’appréhension et la description, par différents modèles, de l’écrouissage latent ;
- l’évolution de la localisation de la déformation au cours d’un chargement cyclique ;
- la définition du « volume élémentaire représentatif » en fonction de l’échelle d’analyse ;
- l’évaluation numérique de la prédiction de plusieurs modèles élastoplastiques.

³« Parce que tu as écrit certains quatrains qui ne manquent pas d’adresse, parce que tu tournes joliment, Sabellus, deux ou trois distiques, je te félicite, mais ne t’admire pas. Il est facile d’écrire joliment des épigrammes, mais écrire un livre, c’est difficile. »

Une procédure d'identification s'appuyant sur des chargements non-proportionnels, et des calculs éléments finis périodiques a été mise en place. Le fait de décrire les comportements sous chargement non-proportionnel a permis d'envisager l'identification de paramètres jusqu'alors mal définis, tels que la matrice décrivant les interactions entre systèmes de glissement.

Le recours aux calculs éléments finis périodiques autorise une identification sur polycristal, ce qui permet d'exploiter des essais plus simples à mettre en œuvre que ceux sur monocristaux. Ces calculs ont nécessité le développement d'une microstructure synthétique spécifique. Celle-ci est tridimensionnelle et périodique. Elle est constituée de polyèdres de Voronoï non tronqués, et dispose d'un maillage qui respecte les joints de grains.

Afin d'alléger les temps de calcul, une pré-identification du comportement est réalisée à l'aide de modèles à champs moyens. Pour cet usage, la règle en β , elle-même validée par le modèle de Berveiller-Zaoui sur une traction simple, est apparue la plus appropriée par sa capacité à représenter les chargements non proportionnels en formulation élastoplastique non linéaire, et sa simplicité d'utilisation.

Une nouvelle description de l'écrouissage latent a été rendue possible grâce à cette identification. Le recours au chargement orthogonal a permis de montrer le poids des interactions colinéaires. Si un système intervenant potentiellement dans une interaction colinéaire est actif, alors l'autre système impliqué dans la même interaction ne glisse pas. Concrètement, cela se traduit au niveau de la matrice d'interaction par un coefficient d'une valeur 30 fois supérieure environ à celle affectée à la formation des verrous de Lomer.

Cette démarche d'identification a été menée pour deux lois de comportement monocristalline : la loi de Tabourot, dite quasi-physique, et celle de Méric et Cailletaud, de nature phénoménologique cristalline. Les résultats obtenus avec ces deux lois sont cohérents.

Les jeux de paramètres obtenus sont ensuite testés avec plusieurs règles de transition d'échelles : calcul par éléments finis, règle en β , modèle de Kröner, et une formulation viscoplastique par linéarisation affine. Le sur-écrouissage propre au chargement orthogonal est bien rendu pour l'ensemble des transitions d'échelles testées, ce qui confirme l'identification monocristalline.

Les mesures de champs à l'échelle « mésoscopique » ont permis des avancées en matière de compréhension des phénomènes de localisation de la déformation.

Les mesures effectuées dans le cadre de chargements proportionnels et non-proportionnels, composés de cisaillement et/ou traction, font apparaître un schéma de localisation complexe, comportant plusieurs échelles de déformation. L'une d'entre elle a manifestement une portée bien supérieure à la zone étudiée (d'une surface d'environ $500 \mu m^2$). Ceci rend difficile l'interprétation des covariogrammes associés. Compte tenu des éléments bibliographiques, la complexité de cette structure de localisation est vraisemblablement à mettre en relation avec celle de la microstructure.

Des observations ont été également conduites dans le cadre d'un essai sous sollicitation cy-

clique, en traction-compression, avec une amplitude de déformation de 2%, et une valeur moyenne non nulle. L'étude est conduite durant 11 cycles, c'est-à-dire jusqu'à stabilisation du comportement. Des mesures de champs sont effectuées à différents stades des cycles.

Rappelons que ces mesures sont réalisées en limite de précision de la méthode. L'analyse quantitative est donc difficile, mais plusieurs observations importantes ont pu être effectuées.

Tout d'abord, la déformation transverse moyennée sur la zone d'étude montre nettement un phénomène de rochet local. Ensuite, plusieurs observations sont effectuées concernant l'évolution du schéma de localisation de la déformation.

- Le schéma de localisation est déjà en place dès le second cycle. Il restera le même tout au long du chargement. Aucune bande de localisation n'apparaît ni ne disparaît par la suite.
- Au sein d'un même cycle, les bandes de localisation apparaissent, se renforcent jusqu'à la sollicitation maximale, pour diminuer ensuite, jusqu'à quasi disparaître.
- D'un cycle à l'autre les bandes réapparaissent au même endroit, mais en s'intensifiant, et en s'élargissant légèrement. Le phénomène d'intensification semble plus marqué que celui de l'élargissement.
- Les zones non déformées le restent tout au long du chargement ; leur présence permet de valider la technique de mesure utilisée.

La nécessité avérée de mettre en rapport la localisation de la déformation en surface et la microstructure du matériau nous a conduit à développer une microstructure permettant à terme de compléter cette approche par des calculs éléments finis. Cette microstructure admet pour surface la cartographie EBSD du matériau sur la zone ayant subi les mesures de champs. Par ailleurs, le volume de cette microstructure a été défini de façon à représenter les caractéristiques principales qui se dégagent de l'analyse EBSD : non-convexité des grains, forte disparité de taille de grains, et présence importante de macles de recuit.

L'évaluation numérique de modèles à champs moyens a nécessité en premier lieu de s'interroger sur la définition du VER, pour un calcul par éléments finis, ceci en fonction de l'échelle d'analyse. Pour cela, une approche statistique a été conduite sur calcul éléments finis parallèles périodiques comportant 200 orientations cristallines. 50 réalisations du même calcul ont été effectuées. Rappelons que la réalisation est ici définie comme l'affectation du jeu d'orientations cristallographiques sur une même microstructure. La moyenne du comportement par phase effectuée sur ces n réalisations permet de définir une approche de type « milieu équivalent ».

Il a alors été constaté que le nombre de réalisations nécessaires à une bonne description statistique de la distribution du comportement en moyenne par phase est bien supérieur à celui requis pour l'échelle macroscopique (10 fois plus de réalisations dans le cas ici étudié). De plus, à l'échelle locale (estimation du comportement de chaque phase), le critère d'évaluation appliqué aux 200 phases converge vers une même asymptote pour 50 réalisations. Pour autant, l'erreur potentielle pose la question de la taille de la microstructure adoptée. Celle-ci est suffisante pour décrire le comportement macroscopique en deux réalisations, voire acceptable pour une seule, mais pas nécessairement à l'échelle locale.

Une fois le comportement de référence défini au travers de cette moyenne sur 50 réalisations, trois modèles à champs moyens issus du schéma auto-cohérent sont ensuite évalués à l'échelle macroscopique et en moyenne par phase. La description du comportement à l'échelle macroscopique est conforme aux attentes : la loi de Kröner surestime le comportement, tandis que le modèle de Berveiller-Zaoui (en traction), et la règle en β fournissent une bonne estimation du comportement. La dispersion des contraintes axiales moyennes par phase, en traction et en compression, est très bien estimée par le modèle en β , très largement surestimée par le modèle de Kröner, légèrement sous-estimée par le modèle de Berveiller-Zaoui (en traction). La dispersion des déformations axiales moyennes par phase est très bien estimée par le modèle de Berveiller-Zaoui en traction. Le modèle de Kröner présente une distribution quasi-uniforme, tandis que celle de la règle en β est trop étalée.

Prolongements possibles

La description de l'écrouissage latent introduite ici ouvre de nouvelles portes en matière de description du comportement. En effet, le chargement orthogonal était jusqu'à présent assez mal décrit par les différentes simulations (à l'exception sans doute de [Gaudin, 2002]). La description des interactions colinéaires le permet désormais. Ceci ouvre de nouveaux espoirs sur des chargements complexes tels que ceux du phénomène du rochet, actuellement difficile à prédire.

Pour autant, il convient auparavant, de poursuivre l'identification avec une base de données expérimentales plus large. En effet, les essais conduits ici ne permettent pas d'identifier les interactions dipolaires. La bibliographie s'appuyant sur la dynamique des dislocations a montré que ces interactions n'intervenaient que de façon très minoritaires dans le comportement mécanique. Pour autant, leur non-identification introduit un biais dans la définition des autres paramètres.

Enfin, en matière d'identification du comportement, une voie avait été ouverte précédemment en s'appuyant sur les mesures de champs. Cette voie n'a pas été poursuivie ici car elle apparaissait relativement lourde comparativement au gain espéré, étant attendu que les mesures actuelles ne donnent pas d'indication dans le volume. Les avancées en matière de mesures de champs tridimensionnelles laissent toutefois espérer à l'avenir un accès aux conditions aux limites expérimentales.

Le schéma de localisation, observé grâce aux mesures de champs par corrélation d'images numériques acquises sous microscope électronique à balayage, appelle des études complémentaires. Il conviendrait, en effet, de mener des essais avec mesures de champs sur une surface plus grande afin de pouvoir quantifier la portée des bandes de localisation, et donc de mieux comprendre ce schéma. Pour cela, il est au préalable nécessaire d'améliorer les durées et conditions d'acquisition qui ne permettaient pas dans notre cas d'envisager de telles mesures.

Les mesures de champs sous chargement cyclique ont apporté des observations novatrices,

mais demandent d'autres efforts pour obtenir des résultats plus quantitatifs. Ces études, situées nécessairement à l'amorçage de la plasticité, et donc en limite de mesure, nécessitent impérativement de modifier les conditions d'acquisition des images. Le LMS dispose depuis peu d'un MEB FEG environnemental sur lequel la machine d'essai traction-compression-torsion est adaptable. Cette adaptation permettrait une durée d'acquisition beaucoup plus courte. Les problèmes d'instabilité du MEB deviendraient alors négligeables au regard de ce qu'ils ont été. La fiabilité des clichés en serait donc grandement accrue. Pour les mêmes raisons, les soucis de contamination au carbone deviendraient quasi-inexistants, permettant ainsi d'effectuer un bien plus grand nombre de mesures. Enfin, l'asservissement du chargement permettrait une étude à grand nombre de cycles, et donc l'accès au chargement de type rochet macroscopique. Par ailleurs, des observations locales ont montré que les bandes de localisation peuvent soit suivre les lignes de glissement intragranulaire, soit plutôt les joints de grains, même dans des situations où les lignes de glissement sont bien visibles. Ce point demande à être approfondi pour mieux comprendre les mécanismes de mise en place de la localisation de la déformation. Pour cela, il conviendrait de coupler les mesures de champs à des analyses par AFM.

La définition du VER selon plusieurs échelles montre tout l'enjeu de la taille et du nombre de réalisations effectuées dès lors qu'est envisagée une approche en moyenne par phase, ou *a fortiori* à une échelle plus locale. La fiabilité de la prédiction du comportement à l'échelle de la phase a montré ses limites dans le cadre d'un agrégat périodique de 200 grains, moyenné sur 50 réalisations. Une étude complémentaire est nécessaire pour montrer l'amélioration que pourrait apporter l'augmentation du nombre de grains.

Au-delà du cuivre, certains résultats de ce travail peuvent être étendus à l'ensemble des matériaux ayant une structure cristallographique cubique à faces centrées. Si l'identification des paramètres d'une loi de comportement est spécifique au matériau, une orientation générale propre aux mécanismes en jeu est transposable. Ainsi, l'activité des interactions colinéaires fait partie de l'ensemble du processus de déformation des matériaux. Il est donc très vraisemblable qu'un tel mécanisme se retrouve dans d'autres polycristaux de structure cubiques à faces centrées ayant une énergie de faute d'empilement assez proche, et sollicités dans la même gamme de température.

Il semble que les schémas de localisation de la déformation à l'échelle mésoscopique soient très fortement liés à la microstructure. Ils sont donc en ceci totalement spécifiques du matériau. Par contre, l'évolution de cette localisation relève sans doute de mécanismes communs à une classe de matériau. Il conviendrait de mener plus d'investigations sur ce sujet.

Enfin, l'évaluation des modèles à champs moyens qui a été conduite est d'avantage propre aux modèles qu'au matériau.

Perspectives

Chacun s'accorde aujourd'hui à considérer qu'il est nécessaire d'introduire dans les modèles de mécanique des milieux continus, de la façon la plus précise possible, la physique du matériau. C'est en effet, le seul moyen de réduire le nombre de paramètres à identifier dans un modèle, et donc d'espérer une bonne prédiction des comportements, en particulier en dehors du domaine d'identification initial. Pour autant, la connaissance fine des mécanismes en jeu n'est pas encore d'actualité. Plusieurs points nous laissent pourtant espérer, pour l'avenir proche, des avancées majeures dans ce domaine.

L'approche expérimentale a longtemps été le seul moyen d'investigation en matière de comportement des dislocations. Etant donné les moyens nécessaires, et le caractère particulièrement fastidieux de la démarche, une étude systématique n'a encore jamais été conduite. Aujourd'hui, la dynamique des dislocations a montré son intérêt majeur en la matière. Mais elle a aussi besoin d'observations *in situ* pour appuyer, confronter, valider ses résultats. Comme l'indiquent les dernières avancées, une synergie entre ces deux approches pourrait déboucher prochainement sur une bien meilleure compréhension des mécanismes d'initiation de la déformation aux échelles fines, et par conséquent sur des modélisations en mécanique des milieux continus bien plus représentatives.

A une échelle un peu plus grande, les mécanismes de localisation de la déformation sont encore aujourd'hui mal connus. S'ils ont été observés, et quantifiés, sur quelques matériaux spécifiques comme les biphasés ou le zirconium, qu'en est-il de cas plus généraux ? Les quelques observations conduites dans cette thèse ont montré la redoutable complexité de la question. Les développements récents des moyens expérimentaux, permettant des temps et conditions d'acquisition bien plus raisonnables, devraient grandement faciliter la tâche des expérimentateurs. Sera-ce suffisant ?

Sans doute pas dans l'immédiat. Les technologies de mesures de champs volumiques et EBSD 3D se mettent actuellement en place. Elles représentent de beaux espoirs, mais en sont encore aux balbutiements et ne sont à peu près accessibles que pour de petits volumes et certains matériaux. Combien de temps faudra-t-il avant de mener des études de plus grandes ampleurs ? Cinq ans pour les optimistes, dix pour les pessimistes ...

Les techniques de reconstruction d'images, analyse morphologique et synthèse de microstructures artificielles sont actuellement à l'ordre du jour pour des polycristaux. La compréhension et la prédiction des phénomènes de localisation de la déformation passeront nécessairement par le dialogue entre calculs éléments finis et mesures expérimentales si l'on souhaite aboutir dans un temps accessible. Il permettra sans doute, à partir de quelques acquisitions, de développer des essais numériques permettant ainsi d'accélérer grandement l'étude de ces phénomènes.

Deux voies sont alors ouvertes ... La représentation à l'identique de la microstructure permet la confrontation directe aux données expérimentales et est très prometteuse en matière

de validation des calculs. Pour autant, elle reste coûteuse, et n'est pas nécessairement suffisante pour comprendre l'impact de la microstructure. Le développement de représentations, partiellement ou totalement synthétiques mais représentatives, a le mérite de permettre de faire varier artificiellement chacun des paramètres matériaux, y compris les paramètres morphologiques. Cette démarche permettra de mieux cerner les mécanismes en cause, mais aussi d'avancer dans la définition des matériaux « à la demande ».

Enfin, les méthodes d'identification du comportement, parfois qualifiées d'inverse parce que partant du comportement de la phase, actuellement en vogue, vont peut-être demander là aussi une certaine synergie entre les approches. Il ne semble pas y avoir actuellement de modèles à champs moyens disponibles pour identifier les comportements en chargements non-proportionnels, par phase (ou à une échelle plus fine encore), en formulation élastovisco-plastique (ou élastoplastique non linéaire), et d'une mise en œuvre accessible. Pour autant, les travaux ici conduits ont montré à quel point cette démarche menée en calculs éléments finis pouvait être gourmande en matière de taille et nombre de calculs. L'interaction entre modèles à champs moyens et calculs éléments finis sera donc particulièrement riche : pré-identification sur modèles en champs moyens, puis validation par calculs éléments finis.

En prenant un peu de recul sur les lignes écrites ci-dessus, les quelques perspectives tracées montrent la récurrence d'un champ sémantique : dialogue, synergie, couplage ... Ces interactions entre approches d'un même problème deviennent désormais, bien plus que possibles, nécessaires. Si la décade passée a vu naître et grandir la formidable thématique, toujours d'actualité, du multi-échelle, gageons que la suivante trouvera son essor dans le multi-approches.

En définitive, s'il n'y avait qu'un mot à retenir de ce travail, ce serait peut être celui de l'intérêt du « dialogue » ... scientifique et humain. Mais nous ouvrons là sans doute un autre débat ...

Bibliographie

Bibliographie

- [Allais *et al.*, 1994] ALLAIS, L., BORNERT, M., BRETHERAU, T. et CALDEMAISON, D. (1994). Experimental characterization of the local strain field in a heterogeneous material. *Acta Metall.*, 42(11):3 865–3 880.
- [Ashby et Verall, 1973] ASHBY, M. et VERALL, A. (1973). Diffusion-accommodated flow and superplasticity. *Acta Metall.*, 21:149–163.
- [Astanin *et al.*, 1973] ASTANIN, V., SISANBAEV, A., PSHENICHNYUK, A. et LAIBYSHEV, O. (1973). Self organization of cooperative grain boundary sliding in aluminium tricrystals. *Scri. Mater.*, 36(1):117–122.
- [Bacroix *et al.*, 1994] BACROIX, B., GENEVOIS, P. et TEODOSIU, C. (1994). Plastic anisotropy in low carbon steels subjected to simple shear with strain path changes. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 13(5):661–675.
- [Baïlon et Dorlot, 2000] BAÏLON, J. et DORLOT, J. (2000). *Des Matériaux*. Presses polytechniques de Montréal.
- [Barbe, 2000] BARBE, F. (décembre, 2000). *Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Baron et le PERFECT Consortium, 2004] BARON, F. et le PERFECT CONSORTIUM (2004). Project presentation (pp). Rapport technique, European commission, Research community.
- [Barva, 2003] BARVA, M. (2003). *Utilisation de la transformée de Radon pour la localisation de micro-outils chirurgicaux dans une image échographique*. Mémoire de Diplôme d'Etudes Approfondies, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon.
- [Basinski et Basinski, 1979] BASINSKI, S. J. et BASINSKI, Z. S. (1979). *Dislocations in Solids*, chapitre 16, Plastic deformation and work hardening, pages 261–271. North-Holland Publishing Company.
- [Bassani et Wu, 1991] BASSANI, J. L. et WU, T. Y. (1991). Latent hardening in single crystals II. Analytical characterization and predictions. *Proc. Royal Soc. London A*, 435:21–41.
- [Batdorf et Budiansky, 1949] BATDORF, S. et BUDIANSKY, B. (1949). A mathematical theory of plasticity based on the concept of slip. Rapport technique 1 871, NACA-TN.
- [Bell, 1964] BELL, J. F. (1964). A generalized large deformation behaviour for face-centred cubic solids-high purity copper. *Philosophical Magazine*, 10:107–126.

- [Benallal et Marquis, 1987] BENALLAL, A. et MARQUIS, D. (1987). Constitutive equations for nonproportional cyclic elastoviscoplasticity. *J. of Eng. Mater. Technol.*, 109:326–336.
- [Berveiller et Zaoui, 1979] BERVEILLER, M. et ZAOUI, A. (1979). An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 26:325–344.
- [Besson et al., 2001] BESSON, J., CAILLETAUD, G., CHABOCHE, J. L. et FOREST, S. (2001). *Mécanique non linéaire des matériaux*. Hermès.
- [Bilger, 2003] BILGER, N. (2003). *Etude micromécanique de l'effet de la présence d'amas d'inclusions sur la transition fragile-ductile d'aciers nucléaires*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Bornert, 1996] BORNERT, M. (1996). *Morphologie microstructurale et comportement mécanique ; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations autocohérentes généralisées*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [Bornert, 2007] BORNERT, M. (2007). Evaluation métrologique d'algorithmes de corrélation d'images numériques. In *Congrès Français de Mécanique, CFM 2007*, Grenoble, France.
- [Bornert et al., 2001a] BORNERT, M., BRETHER, T. et GILORMINI, P. (2001a). *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1, Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermès.
- [Bornert et al., 2001b] BORNERT, M., BRETHER, T. et GILORMINI, P. (2001b). *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2, Comportement non linéaires et problèmes ouverts*. Hermès.
- [Bornert et al., 1993] BORNERT, M., HERVE, E., STOLZ, C. et ZAOUI, A. (1993). Self-consistent approaches and strain heterogeneities in two phase elastoplastic materials. *Applied Mechanics Reviews*, 47:66–76.
- [Bornert et Ponte Castaneda, 1998] BORNERT, M. et PONTE CASTANEDA, P. (1998). Second-order estimates of the self-consistent type for viscoplastic polycrystals. *Proc. Royal Soc. London A*, 454:3 035–3 045.
- [Bouteleux et al., 2007] BOUTELEUX, S., GÉRARD, C., BACROIX, B., BORNERT, M., BRENNER, R., CAILLETAUD, G., CRÉPIN, J. et LECLERCQ, S. (2007). A numerical evaluation of various scale transition rules for uniform field models. In *17th International Workshop of Computational Mechanics of Materials*, Paris, France.
- [Brahme et al., 2006] BRAHME, A., ALVI, M. H., SAYLOR, D., FRIDY, J. et ROLLETT, A. D. (2006). 3D reconstruction of microstructure in a commercial purity aluminium. *Scripta Materialia*, 55:75–80.
- [Brenner, 2001] BRENNER, R. (2001). *Influence de la microstructure sur le comportement en fluage thermique d'alliages de zirconium : analyse expérimentale et mise en œuvre de méthodes d'homogénéisation*. Thèse de Doctorat, Université Paris Nord - Paris XIII.
- [Brenner et al., 2001] BRENNER, R., CASTELNAU, O. et GILORMINI, P. (2001). A modified affine theory for the overall properties of nonlinear composites. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II*, 329:649–654.
- [Brenner et Masson, 2005] BRENNER, R. et MASSON, R. (2005). Improved affine estimates for nonlinear viscoelastic composites. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 24:1 002–1 015.

- [Brenner *et al.*, 2002] BRENNER, R., MASSON, R., CASTELNAU, O. et ZAOUÏ, A. (2002). A "quasi-elastic" affine formulation for the homogenized behaviour of nonlinear viscoelastic polycrystals and composites. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 21:943–960.
- [Bunge, 1982] BUNGE, H. J. (1982). *Texture analysis in materials science - mathematical methods*. London : Butterworths.
- [Cailletaud, 1987] CAILLETAUD, G. (1987). *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse de Doctorat d'Etat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- [Cailletaud, 1988] CAILLETAUD, G. (1988). Une approche micromécanique du comportement des polycristaux. *Revue Phys. Appl.*, 23:353–365.
- [Cailletaud, 1992] CAILLETAUD, G. (1992). A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals. *Int. J. of Plasticity*, 8:55–73.
- [Cailletaud et Pilvin, 1994] CAILLETAUD, G. et PILVIN, P. (1994). Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Eléments Finis*, 3(4):515–541.
- [Cailletaud et Saï, 2008] CAILLETAUD, G. et SAÏ, K. (2008). A polycrystalline model for the description of ratchetting : effect of intergranular and intragranular hardening. *Material Science and Engineering A*, 480(1–2):24–39.
- [Chaboche et Kanouté, 2003] CHABOCHE, J. L. et KANOUTÉ, P. (2003). Sur les approximations "isotropes" et "anisotropes" de l'opérateur tangent pour les méthodes tangentes incrémentale et affine. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II*, (331):857–864.
- [Cornille, 2005] CORNILLE, N. (2005). *Accurate 3D Shape and Displacement Measurement using a Scanning Electron Microscope*. Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse.
- [Decker et Jeulin, 2000] DECKER, L. et JEULIN, D. (2000). Simulations 3D de matériaux aléatoires polycristallins. *Revue de Métallurgie, CITScience et Génie des Matériaux*, 97: 271–275.
- [Déprés *et al.*, 2008] DÉPRÉS, C., FIVEL, M. et TABOUROT, L. (2008). A dislocation-based model for low amplitude fatigue behaviour of face-centred cubic single crystals. *Scripta Materialia*, in press.
- [Devincre *et al.*, 2005] DEVINCIRE, B., HOC, T. et KUBIN, L. P. (2005). Collinear interactions of dislocations and slip systems. *Material Science and Engineering A*, 400–401:182–185.
- [Devincre *et al.*, 2006] DEVINCIRE, B., KUBIN, L. P. et HOC, T. (2006). Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations. *Scripta Materialia*, 54:741–746.
- [Dexet, 2006] DEXET, M. (2006). *Méthode de couplage entre expérimentations et simulations numériques en vue de l'identification de lois de comportement intracristallin. Application aux alliages de zirconium*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Doumalin, 2000] DOUMALIN, P. (2000). *Microextensométrie locale par corrélation d'images numériques application aux études micromécaniques par microscopie électronique à balayage*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.

- [Doumalin et Bornert, 2000] DOUMALIN, P. et BORNERT, M. (2000). Micromechanical applications of digital image correlation techniques. In JACQUOT, P. et EDS, J. F., éditeurs : *Proc. of Interferometry in Speckle Light, Theory and Applications*, pages 67–74, Lausanne. Springer.
- [Doumalin et al., 2003] DOUMALIN, P., BORNERT, M. et CRÉPIN, J. (2003). Caractérisation de la répartition de la déformation dans les matériaux hétérogènes. *Mécaniques & Industries*, 4:607–617.
- [Doumalin et al., 2000] DOUMALIN, P., BORNERT, M. et SOPPA, E. (2000). Computational and experimental investigations of the local strain field in elastoplastic two-phase materials. In *Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage*, volume 1.
- [Elsukova et Panin, 1992] ELSUKOVA, T. et PANIN, V. (1992). Evolution of the structural levels of deformation and self-organization of mesoscopic substructure in polycrystals. *Russian Metallurgy*, 2:61–73.
- [Eshelby, 1957] ESHELBY, J. D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Royal Soc. London A*, 241:376–396.
- [Farhat et Roux, 1991] FARHAT, C. et ROUX, F. (1991). A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 32:1 205–1 227.
- [Feyel, 1998] FEYEL, F. (1998). *Application du calcul parallèle aux modèles à grand nombre de variables internes*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Fivel, 1997] FIVEL, M. (1997). *Etude numérique à différentes échelles de la déformation plastique des monocristaux de structures CFC*. Thèse de Doctorat, Université Joseph Fournier - Grenoble.
- [Fivel, 2006] FIVEL, M. (2006). Plasticité cristalline et transition d'échelle : de l'atome au monocristal. In *Coll. Nat. MECAMAT, Approches multi-échelles en mécanique des matériaux*, Aussois, France.
- [Forest et al., 2006] FOREST, S., JEULIN, D., HOUDAIGUI, F. E., KANIT, T., MADI, K., N'GUYEN, F., ZEGHADI, A. et BOUSSUGE, M. (2006). Calcul de microstructures à morphologie 3D complexes : des crèmes glacées aux réfractaires. In *Coll. Nat. MECAMAT, Approches multi-échelles en mécanique des matériaux*, Aussois, France.
- [François et al., 1991] FRANÇOIS, D., PINEAU, A. et ZAOUI, A. (1991). *Comportement mécanique des matériaux. Volume 1 : élasticité et élastoplasticité*. Hermès.
- [François et al., 1993] FRANÇOIS, D., PINEAU, A. et ZAOUI, A. (1993). *Comportement mécanique des matériaux. Volume 2 : endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact*. Hermès.
- [Franciosi, 1978] FRANCIOSI, P. (1978). *Plasticité à froid des monocristaux CFC : étude du durcissement latent*. Thèse de Doctorat de 3^e cycle, Université Paris Diderot - Paris VII.
- [Franciosi, 1984] FRANCIOSI, P. (1984). *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi statique*. Thèse de Doctorat d'Etat, Université Paris Nord - Paris XIII.

- [Franciosi, 1985] FRANCIOSI, P. (1985). The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall.*, 33(9):1 601–1 612.
- [Franciosi *et al.*, 1980] FRANCIOSI, P., BERVEILLER, M. et ZAOUI, A. (1980). Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metall.*, 28:273–283.
- [Gaudin, 2002] GAUDIN, C. (2002). *Etude des mécanismes associés au rochet cyclique d'un acier austénitique AISI 316L*. Thèse de Doctorat, Université de Technologie de Compiègne.
- [Genevois, 1992] GENEVOIS, P. (1992). *Etude expérimentale et modélisation du comportement plastique anisotrope de tôles d'acier en grandes transformations*. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble.
- [Gérard, 2006] GÉRARD, C. (2006). Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline. In *Coll. Nat. MECAMAT, Approches multi-échelles en mécanique des matériaux*, Aussois, France.
- [Gérard *et al.*, 2008] GÉRARD, C. et AL. (Soumis en 2008). Discussion on latent hardening description for FCC materials : new identifications of the behaviour under complex loading paths.
- [Gérard *et al.*, 2007a] GÉRARD, C., BACROIX, B., BORNERT, M., BRENNER, R., CAILLETAUD, G., CALDEMAISON, D., CHAUVEAU, T., CRÉPIN, J., LECLERCQ, S. et MOUNOURY, V. (2007a). Study of non-proportionnal loading paths : comparison between experimental results and simulations performed by finite element and homogenized models. In *17th International Workshop of Computational Mechanics of Materials*, Paris, France.
- [Gérard *et al.*, 2007b] GÉRARD, C., BACROIX, B., BORNERT, M., BRENNER, R., CAILLETAUD, G., CALDEMAISON, D., CHAUVEAU, T., CRÉPIN, J., MOUNOURY, V. et LECLERCQ, S. (2007b). Etude expérimentale et simulation numérique, au moyen de modèles de plasticité cristalline, de chargements non proportionnels. In *Congrès Français de Mécanique, CFM 2007*, Grenoble, France.
- [Gérard *et al.*, 2006] GÉRARD, C., BACROIX, B., BORNERT, M., BRENNER, R., CAILLETAUD, G., CASTELNAU, O., CRÉPIN, J., FOREST, S., GILORMINI, P. et LECLERCQ, S. (2006). Experimental study and numerical simulation of non proportional loading paths using element crystal plasticity models. In *16th International Workshop of Computational Mechanics of Materials*, Lublin, Pologne.
- [Gérard *et al.*, 2008a] GÉRARD, C., BACROIX, B., BORNERT, M., BRENNER, R., CAILLETAUD, G., CRÉPIN, J. et LECLERCQ, S. (Soumis en 2008a). A numerical evaluation of various scale transition rules for uniform field models.
- [Gérard *et al.*, 2008b] GÉRARD, C., BACROIX, B., BORNERT, M., CAILLETAUD, G., CRÉPIN, J. et LECLERCQ, S. (Accepté en 2008b). Hardening description in FCC materials under complex loading paths. *Computational Materials Science*.
- [Gérard *et al.*, 2008c] GÉRARD, C., BORNERT, M., CALDEMAISON, D., N'GUYEN, F. et CAILLETAUD, G. (Accepté en 2008c). Finite element simulation of strain localisation scheme, and comparison with experimental results, under cyclic loading paths, for an OFHC copper. In *18th International Workshop of Computational Mechanics of Materials*, Beijing, Chine.

- [Gerber, 2002] GERBER, P. (2002). *Etude des liens entre hétérogénéités de déformation et mécanismes de recristallisation. Application au cuivre et ses alliages*. Thèse de Doctorat, Université Paris Nord - Paris XIII.
- [Germain, 1973] GERMAIN, P. (1973). *Mécanique des milieux continus*. Masson.
- [Gilbert, 1962] GILBERT, E. (1962). Random subdivisions of space into crystals. *Ann. Math. Stat.*, 33:958–972.
- [Gilormini, 1996] GILORMINI, P. (1996). *Micromechanics of plasticity and damage of multiphase materials.*, chapitre A critical evaluation of various nonlinear extensions of the self-consistent model. Kluwer Academic Publishers.
- [Gueye *et al.*, 2007] GUEYE, I., JUVIGNY, X., ROUX, F., FEYEL, F. et CAILLETAUD, G. (2007). Analyse et développement d’algorithmes parallèles pour la résolution directe de grands systèmes linéaires creux. In *Congrès Français de Mécanique, CFM 2007*, Grenoble, France.
- [Hansen et Huang, 1998] HANSEN, N. et HUANG, X. (1998). Microstructure and flow stress of polycrystals and single crystals. *Acta Mat.*, 46(5):1 827–1 836.
- [Heinrich *et al.*, 1992] HEINRICH, H., NEUHAUS, R. et SCHWINK, C. (1992). Dislocation structure and densities in tensile deformed CuMn crystals oriented for single glide. *Phys. Stat. Sol.*, 131:299–308.
- [Héripéré, 2006] HÉRIPRÉ, E. (2006). *Méthode de couplage multi-échelles entre simulations numériques polycristallines et mesures de champs pour l’identification des paramètres de lois de comportement et de fissuration des matériaux métalliques*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Héripéré *et al.*, 2007] HÉRIPRÉ, E., DEXET, M., CRÉPIN, J., GÉLÉBART, L., ROOS, A., BORNERT, M. et CALDEMAISON, D. (2007). Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *Int. J. of Plasticity*, 23:1 512–1 539.
- [Hill, 1965] HILL, R. (1965). Continuum micro-mechanisms of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 13:89–101.
- [Hirth, 1960] HIRTH, J. P. (1960). On dislocation interactions in the FCC lattice. *J. of Appl. Phys.*, 32(4):700–706.
- [Hutchinson, 1976] HUTCHINSON, J. W. (1976). Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. Royal Soc. London A*, 348:101–127.
- [Jaoul, 1965] JAOL, B. (1965). *Etude de la plasticité et application aux métaux*. Dunod, Paris.
- [Kanit, 2003] KANIT, T. (2003). *Notion de volume élémentaire représentatif pour les matériaux hétérogènes : approche statistique et numérique*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Kanit *et al.*, 2003] KANIT, T., FOREST, S., GALLIET, I., MOUNOURY, V. et JEULIN, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Structures*, 40:3 647–3 679.

- [Karypis et Kumar, 1998] KARYPIS, G. et KUMAR, V. (1998). Multilevel algorithms for multi-constraint graph partitioning. Rapport technique Technical Report 98-019, University of Minnesota, Department of Computer Science / Army HPC Research Center, Minneapolis, MN 55455.
- [Kocks *et al.*, 1998] KOCKS, U. F., TOMÉ, C. N. et WENK, H. R. (1998). *Texture and anisotropy*. Cambridge University Press.
- [Kröner, 1961] KRÖNER, E. (1961). Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. on the plastic deformation of polycrystals. *Acta Metall.*, 9:155–161.
- [Lebensohn *et al.*, 2005] LEBENSOHN, R. A., CASTELNAU, O., BRENNER, R. et GILORMINI, P. (2005). Study of the antiplane deformation of linear 2-D polycrystals with different microstructures. *Int. J. Solids Structures*, 42:5 441–5 459.
- [Lebensohn et Tome, 1993] LEBENSOHN, R. A. et TOME, C. N. (1993). A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys. *Acta Metall.*, 41:2 611–2 624.
- [Lee *et al.*, 2007] LEE, S. B., ROLLETT, A. D. et ROHRER, G. S. (2007). Three dimensional microstructure reconstruction using FIB-OIM. *Materials Science Forum Vols.*, 558–559: 915–920.
- [Lemaitre et Chaboche, 1993] LEMAITRE, J. et CHABOCHE, J. L. (1993). *Mécanique des matériaux solides*. Seconde édition, Editions Dunod, Paris.
- [Libert, 2007] LIBERT, M. (2007). *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Lin, 1957] LIN, T. H. (1957). Analysis of elastic and plastic strains of face-centred cubic crystal. *J. Mech. Phys. Sol.*, 5:143–149.
- [Madec, 2001] MADEC, R. (2001). *Des intersections entre dislocations à la plasticité du monocristal cfc ; étude par dynamique des dislocations*. Thèse de Doctorat, Université Paris Sud - Paris XI - Orsay.
- [Madec *et al.*, 2003] MADEC, R., DEVINCRE, B., KUBIN, L. P., HOC, T. et RODNEY, D. (2003). The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening. *Science*, (5641):1 879–1 882.
- [Madi, 2006] MADI, K. (2006). *Influence de la morphologie tridimensionnelle des phases sur le comportement mécanique de réfractaires électrofondus*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Makarov, 2000] MAKAROV, P. V. (2000). Localized deformation and fracture of polycrystals at mesolevel. *Theor. and Appl. Fract. Mech.*, 33(1):23–30.
- [Mandel, 1965] MANDEL, J. (1965). Une généralisation de la théorie de la plasticité de W. T. Koiter. *Int. J. Solids Structures*, 48:273–295.
- [Masson, 1998] MASSON, R. (1998). *Estimations non linéaires du comportement global des matériaux hétérogènes en formulation affine*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.

- [Masson et Zaoui, 1999] MASSON, R. et ZAOUI, A. (1999). Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behaviour of polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Sol.*, 47:1 543–1 568.
- [Mathieu, 2006] MATHIEU, J. P. (2006). *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.
- [Méric, 1991] MÉRIC, L. (1991). *Une modélisation mécanique du comportement des monocristaux*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Méric et Cailletaud, 1991] MÉRIC, L. et CAILLETAUD, G. (1991). Single crystal modelling for structural calculations : Part 2. F.E. implementation. *J. of Eng. Mater. Technol.*, 113:171–182.
- [Méric et al., 1994] MÉRIC, L., CAILLETAUD, G. et GASPÉRINI, M. (1994). F.E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension–compression tests. *Acta Metall.*, 42(3):921–935.
- [Méric et al., 1991] MÉRIC, L., POUBANNE, P. et CAILLETAUD, G. (1991). Single crystal modeling for structural calculations. Part 1 : Model presentation. *J. of Eng. Mater. Technol.*, 113:162–170.
- [Michel et al., 1999] MICHEL, J. C., MOULINEC, H. et SUQUET, P. (1999). Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng*, 172(1–4):109–143.
- [Molinari et al., 1987] MOLINARI, A., CANOVA, G. R. et AHZI, S. (1987). A self consistent approach of the large deformation polycrystals viscoplasticity. *Acta Metall.*, 35(12):2 983–2 994.
- [Moulinec et Suquet, 2003] MOULINEC, H. et SUQUET, P. (2003). Intraphase strain heterogeneity in nonlinear composites : a computational approach. *Eur. J. Mech., A/Solids*, 22(5):751–770.
- [Musienko, 2005] MUSIENKO, A. (2005). *Plasticité cristalline en présence de grandes déformations et d'endommagement*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Musienko et al., 2007] MUSIENKO, A., TATSCHL, A., SCHMIDEGG, K., KOLEDNIK, O., PIP-PAN, R. et CAILLETAUD, G. (2007). Three-dimensional finite element simulation of a polycrystalline copper specimen. *Acta Mat.*, 55:4 121–4 136.
- [Muto et Sakai, 2000] MUTO, H. et SAKAI, M. (2000). The large-scale deformation of polycrystalline aggregates : cooperative grain-boundary sliding. *Acta Mat.*, 48(16):4 161–4 167.
- [National de Microscopie Electronique Balayage et de Microanalyses, 2004] National de Microscopie Electronique Balayage et de MICROANALYSES, G. (2004). *L'analyse EBSD, principes et applications*. EDP Sciences, Paris.
- [Natterer, 1986] NATTERER, F. (1986). *The Mathematics of Computerized Tomography*. John Wiley & Sons, Stuttgart.

- [Nebozhyn *et al.*, 2000] NEBOZHYN, M. V., GILORMINI, P. et PONTE-CASTANEDA, P. (2000). Variational self-consistent estimates for viscoplastic polycrystals with highly anisotropic grains. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II*, 328(IIb):11–17.
- [Osipov, 2007] OSIPOV, N. (2007). *Génération et calcul de microstructures bainitiques, approche locale intragranulaire de la rupture*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Osipov et Cailletaud, 2006] OSIPOV, N. et CAILLETAUD, G. (2006). Multiscale microstructure generation. In *Coll. Nat. MECAMAT, Approches multi-échelles en mécanique des matériaux*, Aussois, France.
- [Osipov *et al.*, 2008] OSIPOV, N., GOURGUES-LORENZON, A., MARINI, B., MOUNOURY, V., N’GUYEN, F. et CAILLETAUD, G. (Submitted in 2008). FE modelling of bainitic steels using crystal plasticity.
- [Pilvin, 1990] PILVIN, P. (1990). *Approches multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux*. Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- [Pilvin et Cailletaud, 1990] PILVIN, P. et CAILLETAUD, G. (1990). Intergranular and Transgranular Hardening in Viscoplasticity. In ZYCZKOWSKI, M., éditeur : *Creep in Structures*, volume 4, pages 171–178.
- [Pilvin et Cailletaud, 1994] PILVIN, P. et CAILLETAUD, G. (1994). Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Eléments Finis*, 3:515–541.
- [Ponte-Castaneda, 1991] PONTE-CASTANEDA, P. (1991). The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Sol.*, 39(1):45–71.
- [Ponte-Castaneda, 1996] PONTE-CASTANEDA, P. (1996). Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials. *J. Mech. Phys. Sol.*, 44(6):827–862.
- [Ponte-Castaneda, 2002a] PONTE-CASTANEDA, P. (2002a). Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : I - theory. *J. Mech. Phys. Sol.*, 50(4):737–757.
- [Ponte-Castaneda, 2002b] PONTE-CASTANEDA, P. (2002b). Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations : II-applications. *J. Mech. Phys. Sol.*, 50(4):759–782.
- [Ponte-Castaneda et Suquet, 2001] PONTE-CASTANEDA, P. et SUQUET, P. (2001). Nonlinear composite and microstructure evolution. In *in : Mechanics for a new millenium - ICTAM 2000*, pages 253–273, Chicago, Keuver.
- [Portier, 1999] PORTIER, L. (1999). *Contribution à l’étude de la déformation progressive des structures ; étude expérimentale et étude comparative de lois de comportement*. Thèse de Doctorat, Ecole Normale Supérieure de Cachan.
- [Racine, 2005] RACINE, A. (2005). *Influence de l’orientation des hydrures sur les modes de déformation, d’endommagement et de rupture du Zircaloy-4 hydrure*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.

- [Rekik, 2006] REKIK, A. (Mémoire provisoire en 2006). *Une méthodologie pour une évaluation précise des procédures de linéarisation en homogénéisation non linéaire*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Rekik et al., 2007] REKIK, A., AUSLENDER, F., BORNERT, M. et ZAOUI, A. (2007). Objective evaluation of linearization procedures in nonlinear homogenization : a methodology and some implications on the accuracy of micromechanical schemes. *Int. J. Solids Structures*, 44:3 468–3 496.
- [Rey et al., 2006] REY, C., LIBERT, M., DELFOSSE, J. et MARINI, B. (2006). Simulation des champs mécaniques locaux pour différentes microstructures et agrégats. In *Coll. Nat. MECAMAT, Approches multi-échelles en mécanique des matériaux*, Aussois, France.
- [Rupin, 2007] RUPIN, N. (2007). *Déformation à chaud des métaux biphasés : modélisations théoriques et confrontations expérimentales*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Sachs, 1928] SACHS, G. (1928). On the derivation of a condition of flowing. Zur Ableitung einer Fließbedingung. *Z. Ver. Deu. Ing.*, 72(28):734–736.
- [Sai et al., 2006] SAI, K., CAILLETAUD, G. et FOREST, S. (2006). Micro-mechanical modeling of the inelastic behavior of directionally solidified materials. *Mech. of Materials*, 38:203–217.
- [Saint-Pierre et al., 2008] SAINT-PIERRE, L., HÉRIPRÉ, E., DEXET, M., CRÉPIN, J., BERTOLINO, G. et BILGER, N. (2008). 3D simulations of microstructure and comparaison with experimental microstructure coming from O.I.M. analysis. *Int. J. of Plasticity*, 24(9):1 516–1 532.
- [Saylor et al., 2004] SAYLOR, D. M., FRIDY, J., EL-DASHER, B. S., JUNG, K. Y. et ROLLETT, A. D. (2004). Statistically representative three-dimensional microstructures based on orthogonal observation sections. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 35A:1 969–1 979.
- [Schaeben et al., 1985] SCHAEBEN, H., WENK, H. R. et VADON, A. (1985). *Vector method. Preferred orientation in deformed metals and rocks : an introduction to modern texture analysis*. Academic Press.
- [Schmid et Boas, 1935] SCHMID, E. et BOAS, W. (1935). *Kristallplastizität*. Springer Verlag, Berlin.
- [Schmitt et al., 1985] SCHMITT, J. H., AERNOUDT, E. et BAUDELET, B. (1985). Yield loci for polycrystalline metals without texture. *Material Science and Engineering*, 75:13–20.
- [Schroeter et McDowell, 2003] SCHROETER, B. M. et MCDOWELL, D. L. (2003). Measurement of deformation fields in polycrystalline OFHC copper. *Int. J. of Plasticity*, 19:1 355–1 376.
- [Siska, 2007] SISKI, F. (2007). *Continuum vs. dislocation dynamics modelling of thin films*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Soppa et al., 2001] SOPPA, E., DOUMALIN, P., BINKELE, P., WEISENDANGER, T., BORNERT, M. et SCHMAUDER, S. (2001). Experimental and numerical characterization of in-plane deformation in two-phase materials. *Computational Materials Science*, 21:261–275.
- [Tabourot, 1992] TABOUIROT, L. (1992). *Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes transformations*. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble.

- [Tabourot, 2001] TABOUROT, L. (2001). *Vers une vision unifiée de la plasticité cristalline*. Mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches, Université de Savoie.
- [Tabourot *et al.*, 1997] TABOUROT, L., FIVEL, M. et RAUCH, E. (1997). Generalised constitutive laws for f.c.c. single crystals. *Material Science and Engineering A*, 234–236:639–642.
- [Tabourot *et al.*, 1999] TABOUROT, L., FIVEL, M. et RAUCH, E. (1999). Physically based constitutive equations for f.c.c. single crystals. In *Proceedings of int. Conf. Plasticity'99*, Cancun, Mexico.
- [Tanguy, 2001] TANGUY, B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- [Tatschl et Kolednik, 2003] TATSCHL, A. et KOLEDNIK, O. (2003). On the experimental characterization of crystal plasticity in polycrystals. *Material Science and Engineering A*, 342(1–2):152–168.
- [Taylor, 1938] TAYLOR, G. I. (1938). Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals.*, 62:307–324.
- [Toft, 1996] TOFT, P. (1996). *The Radon Transform - Theory and Implementation*. Thèse de Doctorat, Technical University of Denmark.
- [Wu *et al.*, 1991] WU, T. Y., BASSANI, J. L. et LAIRD, C. (1991). Latent hardening in single crystals, I. Theory and experiments. *Proc. Royal Soc. London A*, 435:1–19.
- [Yang et Bacroix, 1996] YANG, S. et BACROIX, B. (1996). Shear banding in strain hardening polycrystals during rolling. *Int. J. of Plasticity*, 12(10):1 257–1 285.
- [Zeghadi, 2005] ZEGHADI, A. (2005). *Effet de la morphologie tri-dimensionnelle et de la taille de grain sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

Annexes

Annexe A

Le modèle de Tabourot avec écrouissage cinématique

« Qu'est-ce que le passé, sinon du présent qui est en retard ? »

Pierre Dac (1896-1975), *L'os à moelle*

CETTE ANNEXE vient en complément bibliographique du chapitre 1. Son objet est de présenter succinctement la dernière évolution du modèle de Tabourot [[Déprés et al., 2008](#)]. Cette dernière n'a pas été utilisée dans ce travail de thèse, bien qu'adaptée au chargement cyclique, car sa parution est intervenue trois mois avant la soutenance du présent travail.

La formulation quasi-physique ici utilisée n'est pas celle décrite ci-dessus, mais celle publiée début 2008 par Déprés, Fivel et Tabourot [Déprés *et al.*, 2008]. Par rapport à la version précédente [Tabourot *et al.*, 1997], celle-ci permet cette fois de décrire des chargements cycliques. Elle est donc en ceci davantage comparable à la loi phénoménologique cristalline étudiée [Méric et Cailletaud, 1991].

Présentation de la formulation du modèle de Tabourot écrite pour un chargement cyclique [Déprés *et al.*, 2008]

La loi d'écoulement, qui gouverne le taux local de déformation $\dot{\gamma}^s$ à partir d'une cisssion résolue locale, s'appuie sur la théorie de l'activation thermique du glissement. Elle s'écrit classiquement :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau - \tau_d}{s} \right|^{1/m} \text{sign}(\tau - \tau_d), \quad (\text{A.1})$$

où τ décrit la cisssion appliquée, m un exposant décrivant la sensibilité à la vitesse de déformation, et $\dot{\gamma}_0$ une vitesse de déformation de référence. τ_d est la contrainte interne à longue distance, liée à la localisation de la déformation. Elle s'exprime selon :

$$\tau_d = \mu M(\gamma_s - \gamma), \quad (\text{A.2})$$

avec M un coefficient phénoménologique, et μ le module de cisaillement. s est la force des dipôles de dislocation, et s'exprime par :

$$s = \frac{\mu b}{8\pi(1 - \nu)h}, \quad (\text{A.3})$$

avec μ et ν respectivement les modules de cisaillement et coefficient de Poisson, b la norme du vecteur de Burgers, h la hauteur du dipôle. Notons par ailleurs que la valeur moyenne de la force s des dipôles de dislocation est supposée proportionnelle à la densité de dislocation $\sqrt{\rho}$:

$$\bar{s} = \tau_0 + \alpha \mu b \sqrt{\rho}. \quad (\text{A.4})$$

Enfin, l'évolution de la densité de dislocations est décrite de la même façon que dans [Tabourot *et al.*, 1997] :

$$\dot{\rho} = \frac{1}{b} \left(\frac{\sqrt{\rho}}{K} - 2\gamma_c \rho \right) |\dot{\gamma}|. \quad (\text{A.5})$$

Notons qu'aucune matrice permettant de prendre en compte les interactions entre systèmes de glissement n'est présente dans cette formulation.

Hormis donc cette absence de matrice d'interaction, toute l'évolution entre les deux formulations [Tabourot *et al.*, 1997] et [Déprés *et al.*, 2008] réside dans la loi d'écoulement.

Annexe B

Principales caractéristiques du cuivre

« Seul le rythme provoque le court-circuit poétique
et transmue le cuivre en or, la parole en verbe. »

Léopold Sédar Senghor (1906-2001), *Comme les lamantins vont boire à la source*

CETTE ANNEXE décrit le matériau de l'étude, à savoir du cuivre OFHC (*Oxygen Free High Conductivity*).

Les caractéristiques standard telles que les propriétés physico-chimiques, les traitements thermomécaniques effectués en fonderie, ou encore les textures caractéristiques sont brièvement rappelées.

L'entreprise Griset, qui a fourni les tôles utilisées dans cette thèse, a eu l'amabilité de nous accueillir en ses murs. Leur protocole d'élaboration des métaux cuivreux est ici présenté.

B.1 Caractéristiques générales physico-chimiques

Il existe principalement trois nuances de cuivre fonction du taux d'oxygène (voir tableau B.1) : le cuivre contenant de l'oxygène (nuance I), le cuivre désoxydé avec désoxydant résiduel (nuance II) et le cuivre exempt d'oxygène ou désoxydé sans désoxydant résiduel (nuance III). Deux types de cuivre sont donc exempts d'oxygène ; ils se distinguent par leur niveau de pureté.

Nuance		Teneur en cuivre (%)	Impureté (ppm)
I	$Cu - a_1$	99,99	0 : 200 - 400 Ag : 5 - 20 S, Fe, Ni : 5 - 15 As, Se, Sn, Pb : 1 - 5 Te, Au, Bi : 1 - 5
	$Cu - a_2$	> 99,99	0 : 200 - 400 Ag : 5 - 20 S, Fe, Ni : 5 - 15 As, Se, Sn, Pb : 1 - 5 Te, Au, Bi : < 1
	$Cu - a_3$	99,85	0 : 200 - 400 Ag : 5 - 20 S, Fe, Ni : 10 - 20 As, Se, Sn, Pb : 1 - 5 Te, Au, Bi : 1 - 5
II	$Cu - b_1$	99,90	P : 130 - 500
	$Cu - b_2$	99,90	P : 40 - 120
III	$Cu - c_1$	99,95	Ag : 5 - 20 S, Fe, Ni : 5 - 15 As, Se, Sn, Pb : 1 - 5 Te, Au, Bi : < 1
	$Cu - c_2$	99,99	Ag : 1 - 5 S, Fe, Ni : 5 - 15 As, Se, Sn, Pb : 1 - 5 Te, Au, Bi : < 1

TAB. B.1 – Nuances du cuivre [Gerber, 2002].

Ces matériaux présentent des conductivités électrique et thermique particulièrement élevées : de l'ordre de $390 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour la conductivité thermique à 20 °C, et de l'ordre de $385 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour la capacité thermique massique à 20 °C.

Température de liquidus ($^{\circ}\text{C}$) :	1 065 à 1 083
Température de solidus ($^{\circ}\text{C}$) :	-
Intervalle de solidification ($^{\circ}\text{C}$) :	-
Masse volumique à 20 $^{\circ}\text{C}$ ($\text{kg}.\text{dm}^{-3}$) :	8,89 à 8,92
Coefficient de dilatation linéaire ($10^{-6}.\text{K}^{-1}$) :	16,8
Capacité thermique massique à 20 $^{\circ}\text{C}$ ($\text{J}.\text{kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$) :	385
Conductivité thermique à 20 $^{\circ}\text{C}$ ($\text{W}.\text{m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) :	389
Conductivité électrique à 20 $^{\circ}\text{C}$ (% IACS) :	100
Résistivité électrique à 20 $^{\circ}\text{C}$ ($10^{-8}.\Omega.\text{m}$) :	1,7
Coefficient de température de la résistivité de 0 $^{\circ}\text{C}$ à 100 $^{\circ}\text{C}$ ($10^{-3}.\text{K}^{-1}$) :	3,9

TAB. B.2 – Propriétés physiques des cuivres électrolytiques (données Griset).

B.2 Mode de déformation

Comme pour tous les métaux et alliages en solution solide de structures cubiques à faces centrées, l'énergie de faute d'empilement est le paramètre déterminant pour les mécanismes de déformation. Le cuivre a une énergie de faute d'empilement assez élevée : de l'ordre de $50 \text{ mJ}.\text{m}^{-2}$. Le glissement peut donc être planaire ou dévié.

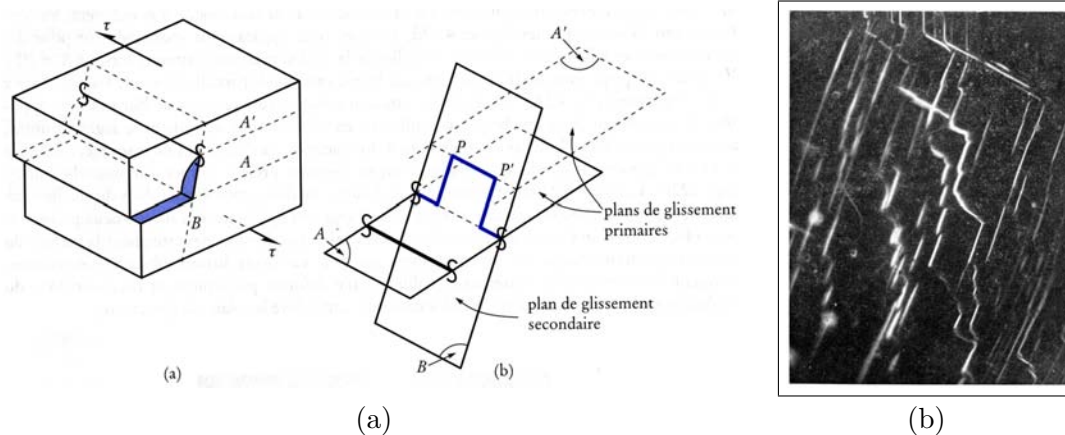


FIG. B.1 – (a) Schéma du glissement dévié d'une dislocation-vis : la dislocation passe du plan de glissement primaire A au plan de glissement primaire A', par l'intermédiaire du plan de glissement secondaire B. Le segment PP', dans le plan de glissement A', peut devenir une source de Frank-Read [Bailon et Dorlot, 2000]. (b) Glissement dévié dans l'aluminium raffiné ; $G=800$. [Jaoul, 1965]

Par ailleurs, le glissement observé au MEB lors de nos expérimentations était le plus souvent primaire, comme le montre la figure B.2.

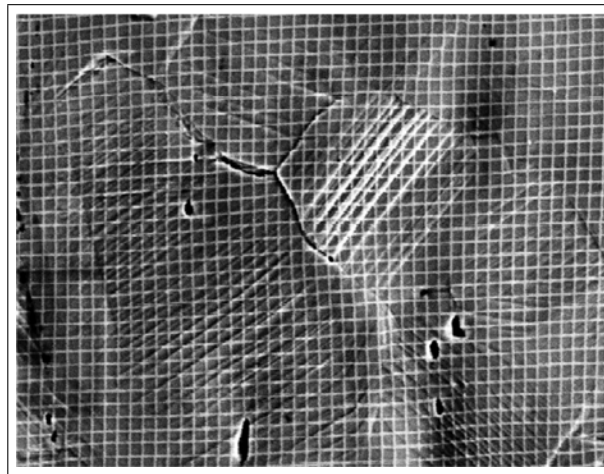


FIG. B.2 – Observation de glissement simple lors de nos essais, sur la tôle n°2 (laminée à chaud). Les joints de grains du polycristal se distinguent en limite des lignes de glissement, mettant en valeur les lignes de glissement simple sur plusieurs grains. La grille blanche qui apparaît sur les images est une microgrille d'or déposée à la surface de l'échantillon pour effectuer des mesures des champs par corrélation d'images. Observations effectuées sous microscope électronique à balayage, en électrons secondaires, à grossissement x200.

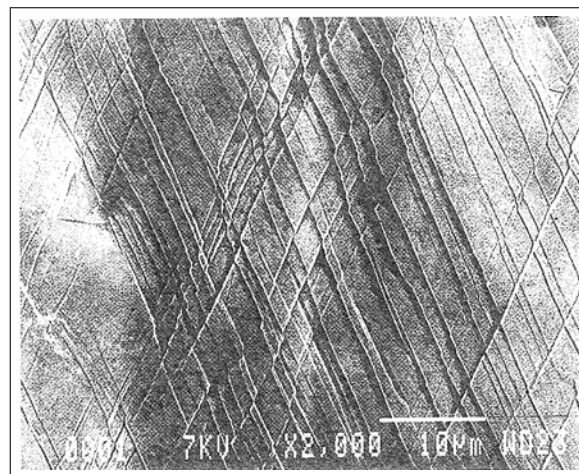


FIG. B.3 – A droite : lignes de glissement dans un monocristal de cuivre orienté en glissement [François *et al.*, 1991].

Module d'Young (état recuit, MPa)	120 000
Module de torsion (état recuit, MPa)	45 000
Coefficient de Poisson	0,33

TAB. B.3 – Propriétés mécaniques des cuivres électrolytiques (données Griset).

B.3 Les textures du cuivre

La texture de laminage du cuivre pur est généralement composée exclusivement de la fibre β , appelée pour cette raison texture « cuivre ». Cette fibre β est composée de l'ensemble des orientations qui ont un axe $\langle 110 \rangle$ incliné de 60° de DN vers DL. Par ailleurs, la composante cube, encore appelée « texture en dé », apparaît lors des étapes de recuit. D'autres orientations, moins typiques des textures de laminage ou de recuit des matériaux de structure c.f.c, peuvent apparaître, notamment du fait du maillage intervenant lors du recuit (voir tableau B.4 et figure B.4).

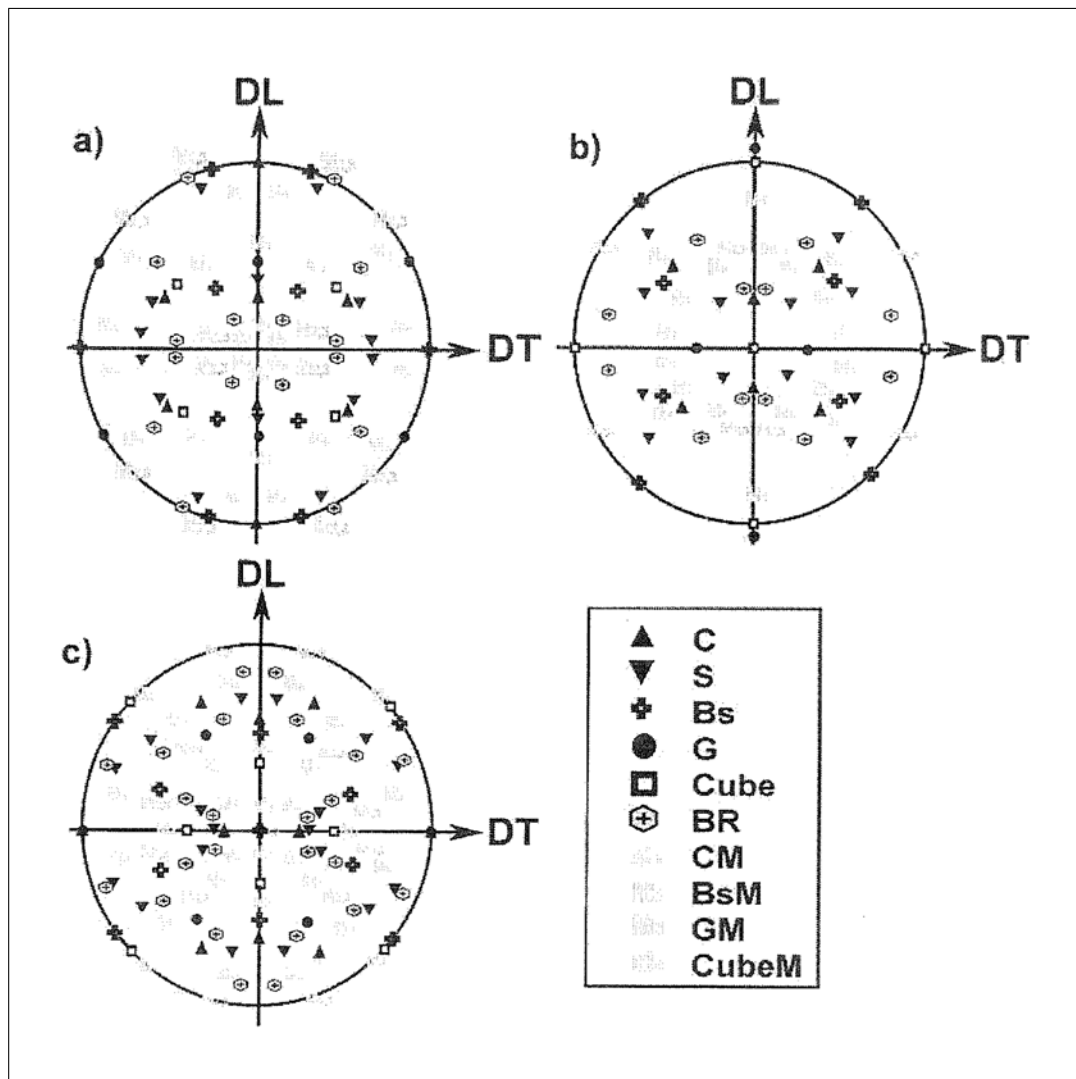


FIG. B.4 – Localisation des orientations idéales sur les principales figures de pôles. a) $\{111\}$ b) $\{200\}$ c) $\{220\}$.

Orientation	Indices de Miller	Angle d'Euler (en °)	Caractéristiques
C	112 < 111 >	(90,35,45)	Composante de laminage, fibre β
S	123 < 634 >	(27,64,14), (57,29,63), (57,77,26)	Composante de laminage, fibre β
Bs	011 < 112 >	(35, 45, 0/90), (55,90,45)	Composante de laminage, fibres α et β
G	011 < 100 >	(0,45,0/90), (90,90,45)	Composante de laminage, fibre α
Cube	100 < 001 >	(0,0,0), (ϕ_1 ,0,90- ϕ_1)	Composante de recristallisation
BR	236 < 385 >	(81,34,30)	Composante de recristallisation
CM	552 < 115 >	(90,74,45)	Composante de maclage C
BsM	001 < 255 >	(74,45,0/90), (16,90,45), (55,20,45)	Composante de maclage Bs
GM	011 < 122 >	(70,45,0), (90,19,45), (19,90,45)	Composante de maclage G
CubeM	122 < 221 >	(45,71,45)	Composante de maclage Cube

TAB. B.4 – Principales orientations utilisées pour la description des textures ; dans l'espace d'Euler réduit, chaque orientation peut apparaître à trois positions différentes pour respecter les symétries cubique et orthotrope (d'où les différents triplets d'angles proposés).

B.4 Traitements thermomécaniques

Les traitements thermomécaniques industriels imposés constituent un ensemble de huit étapes successives au maximum. Le matériau subit en premier lieu un laminage à chaud, suivi d'un traitement superficiel de la tôle en sortie de ligne à chaud. Plusieurs laminages à froid et recuits successifs sont ensuite appliqués. Le nombre de passes et les taux de réduction sont fonction de l'épaisseur finale souhaitée ainsi que du domaine d'utilisation du matériau. Le recuit industriel s'effectue, pour du cuivre électrolytique, à une température de l'ordre de 300 °C pendant 4 à 5 h pour un recuit statique sous atmosphère inerte (N_2).

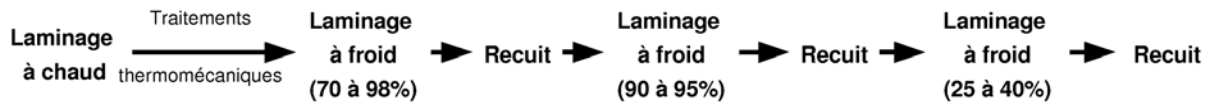


FIG. B.5 – Schéma du traitement thermomécanique industriel imposé.

Les tôles de cuivre utilisées lors de nos travaux proviennent de l'entreprise Griset, spécialisée dans l'obtention de produits laminés de cuivre, laiton, bronze et aluminium. La visite de leur usine de Villers Saint-Paul nous a permis d'assister à la fabrication des tôles.

Fonderie et chauffage du lingot. L'étape de fonderie permet d'obtenir un lingot de 15 T à partir du minerai. Le lingot est ensuite chauffé grâce à 2 fours utilisés successivement. Le premier, à gaz, permet de monter à 400 °C, puis le second, électrique, conduit à la température voulue. Le lingot est ensuite transporté automatiquement vers le laminoir à chaud.



Le four présenté ici est un four électrique permettant de porter à température le lingot avant laminage à chaud.

Temps de chauffe par lingot : 70 min de la température ambiante à 900 °C

Rendement : 95 %

Puissance : 1 200 kW

Température de chauffe max : 950 °C

FIG. B.6 – Chauffage du lingot - Conception Griset.

Le laminage à chaud. Le laminage du lingot débute par le laminage à chaud permettant d'obtenir en sortie des tôles de l'ordre de 15 mm avec une texture *a priori* recristallisée. En sortie de laminoir, la température est estimée à 400 °C environ. Vient ensuite une trempe permettant de faire redescendre la température du métal aux environs de 100 °C.



FIG. B.7 – Laminage à chaud - Conception Griset.

Le laminage à froid. Deux laminages à froid sont effectués. Le premier, situé directement en sortie de trempe, après laminage à chaud, permet d'obtenir une épaisseur de 14 *mm*. Cette section comporte d'abord un fraisage permettant d'enlever les zones écrouies. A la fin de cette étape, les tôles sont enroulées puis stockées, le second laminage étant fonction de la commande des clients.

Vient ensuite la seconde partie du laminage à froid. Elle permet d'obtenir des tôles d'épaisseurs allant de 5 *mm* à moins de 1 *mm*. Des étapes de recuit sont intercalées si nécessaires.



L'épaisseur obtenue est contrôlée régulièrement, et notamment en sortie, avec une précision de l'ordre du micromètre (Griset garantit une précision 5 micromètres).

FIG. B.8 – Laminage à froid - Conception Griset.

Le recuit. Lorsque le matériau nécessite un recuit, deux fours peuvent être utilisés.

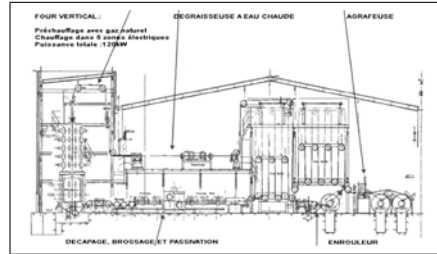
a) Le recuit en continu

Pour les tôles d'épaisseur moyenne, un recuit en continu est effectué. Il présente l'avantage de nécessiter beaucoup moins de temps. De plus, au cours de la même phase de traitement de la tôle, plusieurs opérations sont effectuées :

- le dégraissage à l'eau chaude,
- le décapage, brossage,
- la passivation (dépôt d'un film assurant la passivation pendant une durée minimale de 6 mois),

– et enfin, le recuit.

Afin d'optimiser la succession des séquences, les tôles sont agrafées les unes aux autres.



Largeur max : 450 mm

Épaisseur min / max : 0.2 mm / 1.25 mm

Production : 1 500 kg.h⁻¹

Vitesse Max : 40 m.min⁻¹

Type de four : vertical avec préchauffage gaz et chauffage électrique

FIG. B.9 – Ligne de dégraissage, recuit et décapage - Conception Griset.

b) Le recuit statique

Les tôles d'épaisseurs extrêmes (très fines, ou très épaisses) ne permettent pas d'utiliser la même chaîne d'automatisation. Un recuit statique est donc effectué. Griset a conçu un four cloche contenant 4 bobines, et permettant de porter en température le métal pendant 5 heures, sous atmosphère inerte de N₂ (en circulation). Il faut environ 4 heures pour monter en température, et autant pour redescendre.

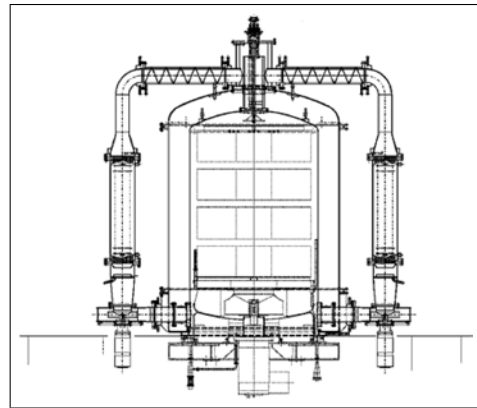


FIG. B.10 – Four cloche de recuit statique sous N₂ pendant 5 heures - Conception Griset.

B.5 Tôles utilisées dans le cadre de cette thèse

Deux types de tôles sont utilisés pour réaliser la partie expérimentale de cette thèse. Les compositions de chargements monotones nécessitent des éprouvettes d'assez faibles épaisseurs. Elles sont prélevées, comme indiqué au chapitre 1, dans deux tôles ayant subi laminage à chaud, puis à froid, et recuit. Leur épaisseur finale est de 0,5 mm.

Le chargement cyclique nécessite au contraire des tôles épaisses pour y prélever des éprouvettes cylindriques d'un diamètre suffisant pour ne pas flamber en compression. Elles sont donc

découpées dans une tôle de 15,7 *mm* d'épaisseur. Celle-ci n'a subi que le laminage à chaud. Les deux matériaux ont été caractérisés par mesures de texture par diffraction aux rayons X, et analyse de la microstructure par cartographie EBSD. Le premier présente une texture cube marquée, tandis que le second a une texture peu commune pour un cuivre ... Ces résultats sont présentés respectivement aux annexes **C**, **D**.

En conclusion ...

En termes de caractéristiques physico-chimiques, le cuivre présente des conductivités électrique et thermique élevées. Il existe principalement trois nuances de cuivre, celle qui est utilisée ici est désoxydée.

L'énergie de faute d'empilement du cuivre est de 50 mJ.m^{-2} . Le glissement peut être planaire ou dévié.

La texture de laminage du cuivre pur est le plus souvent composée exclusivement de la fibre β (texture « cuivre »). La composante cube (« texture en dé ») apparaît lors des étapes de recuit. Les traitements thermomécaniques imposés comportent jusqu'à huit étapes : laminage à chaud, puis à froid, puis une succession de recuits et laminages à froid, dont le nombre dépend de l'épaisseur finale désirée.

Annexe C

Mesures de texture cristallographique par diffraction aux rayons X

« Le style est comme le cristal ; sa pureté fait son éclat. »

Victor Hugo (1802-1885), *Odes et ballades*

CETTE ANNEXE détaille les mesures de textures effectuées dans le cadre de cette thèse. La technique de mesure par diffraction aux rayons X est tout d'abord succinctement décrite. Pour plus d'informations, il convient de se rapporter notamment aux références : [\[Kocks et al., 1998\]](#), [\[Bunge, 1982\]](#), [\[Schaeben et al., 1985\]](#), [\[Gerber, 2002\]](#), ... Puis, les résultats des mesures réalisées sur les deux produits en cuivre support des expérimentations sont présentés et analysés.

C.1 Mesure de texture par diffraction aux rayons X

C.1.1 Caractérisation de la texture cristallographique

Généralités

La texture cristallographique d'un métal ou d'un alliage (produite après déformation ou développée au cours de la recristallisation) est constituée d'une ou plusieurs orientations définie(s) par les indices de Miller selon une famille de plans $\{hkl\}$ et une famille de direction $\langle uvw \rangle$. Dans le cas d'un matériau déformé par laminage, pour lequel un référentiel macroscopique peut être défini selon (DL, DN, DT), DL étant la direction de laminage, DT, la direction transverse, et DN, la direction normale, la convention correspond à expliciter, pour l'orientation donnée, la famille de plans $\{hkl\}$ contenue dans le plan de laminage (plan constitué par les directions DL,DT) et la famille de directions $\langle uvw \rangle$ parallèle à DL.

Figures de pôle

Une figure de pôles $\{hkl\}$, représentant la projection stéréographique sur le plan de l'échantillon de la distribution de densité de pôles d'une famille de plans $\{hkl\}$ dans toutes les directions de l'échantillon, peut être constituée par mesure de l'intensité diffractée I pour différentes valeurs de (ϕ, χ) . Une figure de pôles, projection stéréographique relative à un ensemble de directions, permet donc la visualisation des orientations cristallographiques d'une texture donnée. Elle est définie par la fraction volumique $\frac{dV}{V}$ de matériau ayant leur direction cristallographique h parallèle à la direction du matériau y :

$$\frac{dV}{V} = \frac{1}{4\pi} P_h(y) dy. \quad (C.1)$$

Fonction de distribution des orientations

La fonction de distribution des orientations (FDO) au sein d'un matériau polycristallin permet une description statistique de la texture. Soit dV la totalité des éléments de volume inclus au sein du volume V , possédant l'orientation g à l'intérieur d'un élément d'orientation dg . La FDO $f(g)$ est alors définie à partir de l'expression :

$$\frac{dV}{V} = f(g) \cdot dg. \quad (C.2)$$

L'orientation g d'un grain au sein d'un matériau polycristallin est définie par la relation permettant le passage d'un système de coordonnées K_m , relatif au grain, d'axes (x_m, y_m, z_m) , au

système de coordonnées K_M , d'axes (x_M, y_M, z_M) , relatif à l'échantillon :

$$K_m = g.K_M. \quad (\text{C.3})$$

L'orientation g se définit, dans l'espace d'Euler, par le triplet (ϕ_1, Φ, ϕ_2) , conduisant à la matrice de passage :

$$g = (hkl)[uvw] = \phi_1, \Phi, \phi_2 = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{C.4})$$

avec $0 \leq \phi_1 < 2\pi$, $0 \leq \Phi < \pi$, et $0 \leq \phi_2 < 2\pi$. Si les figures de pôles expérimentales ne permettent pas une description totale de la texture, les FDO autorisent une approche bien plus quantitative, décrivant l'ensemble des orientations constituant la texture cristallographique. Les FDO sont calculées à partir des figures de pôles issues des mesures de texture expérimentales. Il existe principalement deux méthodes de calcul : la méthode harmonique, et la méthode vectorielle [Schaeben *et al.*, 1985]. Dans le cas de la méthode harmonique, la FDO est calculée à partir de l'équation :

$$P_h(y) = \frac{1}{2\pi h l l_y} \int f(g) d\chi \quad (\text{C.5})$$

avec $y = \alpha, \beta$ et $g = \phi_1, \Phi, \phi_2$. χ représente l'angle de rotation du grain d'orientation g par rapport à la direction commune h_y .

Une solution analytique de l'équation C.5 est connue pour les fonctions harmoniques $K_l^n(y), T_l^{mn}(g)$:

$$\frac{1}{2\pi h l l_y} \int T_l^{mn}(g) d\chi = \frac{2}{2l+1} K_l^{*m}(h).K_l^n(y). \quad (\text{C.6})$$

Pour chaque combinaison des indices (l, m, n) est associée une fonction $T_l^{mn}(g)$, avec :

$$f(g) = \sum_{l=0} \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{n=-l}^{+l} C_l^{mn} T_l^{mn}(g) \quad (\text{C.7})$$

où C_l^{mn} sont les facteurs harmoniques.

C.1.2 Mesure de la texture

La diffraction se produit quand une radiation électromagnétique interagit avec les atomes d'un réseau cristallographique et quand la longueur d'onde diffractée équivaut à l'espace interréticulaire. A partir des relations basées sur les découvertes de Laue et Bragg, la diffraction des rayons X peut être interprétée comme une réflexion sur une famille de plans $\{hkl\}$. Pour une famille donnée de plans cristallographiques $\{hkl\}$, de distance interréticulaire d , la relation de Bragg donne la relation entre l'angle d'incidence θ (angle de Bragg) du faisceau par rapport aux plans considérés $\{hkl\}$, sa longueur d'onde λ , et d :

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (\text{C.8})$$

où n est un entier et représente l'ordre de diffraction.

Les textures cristallographiques peuvent être déterminées par différentes techniques expérimentales. La plus couramment utilisée procède par application de la méthode Schultz en réflexion, pour laquelle un dispositif particulier permet d'accéder à l'ensemble des plans $\{hkl\}$ pour chaque orientation cristallographique constituant la texture. L'angle entre le faisceau incident et le détecteur (2θ) est fixé par la loi de Bragg en fonction de la longueur d'onde et de la famille de plans cristallographiques $\{hkl\}$ à mesurer. L'ensemble des orientations (et donc des familles de plans $\{hkl\}$) constituant la texture est accessible en utilisant un goniomètre de texture permettant l'application d'un système d'angles de rotation ϕ et χ (figure C.1). La normale à la surface de l'échantillon est placée parallèlement à l'axe de rotation ϕ et tourne selon ce dernier dans son propre plan. L'angle de rotation par rapport à l'angle ϕ correspond à l'angle azimutal et la rotation selon χ à une rotation polaire. A chaque instant l'intensité diffractée sur les familles de plans du réseau est proportionnelle au volume de cristallites ayant l'orientation g .

C.2 Mesures de texture effectuées

L'appareillage utilisé est un goniomètre 4 cercles de la société Inel monté en géométrie du type Bragg-Brentano. La source est de type foyer ponctuel Cobalt associée à un monochromateur graphite plan et à un collimateur circulaire dont le diamètre sera ajusté en fonction de la taille des grains du matériau analysé ($\lambda = 1.7902 \text{ \AA}$, $2/3 k\alpha_1 - 1/3 k\alpha_2$). Le porte échantillons possède les trois rotations classiques (ω/θ , ϕ , ψ) et une possibilité de translation de l'échantillon dans le but d'optimiser la statistique de comptage. Le dispositif de détection est constitué d'un jeu de fentes croisées disposées devant un détecteur ponctuel (l'ajustement de la largeur et de la hauteur des fentes est asservi au type d'analyse).

La procédure de mesure des différents échantillons est décrite ici.

- Un trièdre macroscopique direct (DN, DL, DT) est associé à chaque échantillon.
- Les réflexions sur les trois familles de plan $\{hkl\}$ les plus intenses, à savoir $\{111\}$, $\{200\}$, $\{2220\}$, sont recherchées.
- Des spectres de diffraction sont acquis pour déterminer les couples $\theta/2\theta$ des réflexions précédemment citées ($\Delta 2\theta = 0.2^\circ$). Ces positions angulaires serviront de références pour l'acquisition des figures de pôles.
- Les figures de pôles sont à leur tour obtenues : $\theta/2\theta$ sont fixés aux valeurs des angles de Bragg des plans $\{hkl\}$ choisis, avec translation ou non de l'échantillon suivant le type d'analyse voulu. La réalisation de ces acquisitions s'effectue pour une couronne considérée des figures de pôles : $\psi = \text{constante}$ et rotation angulaire sur cette couronne par pas $\Delta\phi = 5^\circ$, avec intégration du signal reçu par le détecteur lors de cette rotation. Une fois la rotation de l'échantillon autour de sa normale effectuée (*i.e.* $\phi = 0$ à 360° , $\Delta\phi = 5^\circ$), l'angle ϕ est tourné de 0° à 80° par pas $\Delta\psi = 2,5^\circ$.
- Les figures de pôles brutes sont corrigées du bruit de fond et de la défocalisation, puis sont normalisées.



FIG. C.1 – Goniomètre de texture avec lequel les mesures ont été effectuées (LPTM - Université Paris13).

- Les fonctions de distributions des orientations sont ensuite calculées, par la méthode harmonique, à l'aide du logiciel Labotex (<http://www.labosoft.com.pl>). Ce calcul donne accès aux figures de pôles complètes, à la fonction de distribution des orientations, et à un jeu d'orientations ($\{hkl\} \langle uvw \rangle$, φ_1 , Φ , φ_2). Ce jeu d'orientations, associées aux fractions volumiques correspondantes, sera exploité dans le cadre de la prise en compte de la texture lors des simulations du comportement.

Comme indiqué à l'annexe B, deux tôles différentes sont utilisées pour réaliser la partie expérimentale de cette thèse. Sur chacune d'entre elles, une analyse texturale a été réalisée. Une préparation de l'échantillon est alors nécessaire. Un polissage mécanique est tout d'abord effectué jusqu'au papier de granulométrie 1 200. Une attaque à l'acide nitrique (HNO_3 , dilué à 64 %) durant une dizaine de secondes permet d'enlever la couche écrouie par le polissage mécanique. Après rinçage à l'eau et à l'éthanol, les textures peuvent être mesurées.

C.2.1 Mesure de texture sur la tôle n°1

Les compositions de chargements monotones nécessitent des éprouvettes d'assez faible épaisseur. Elles ont été prélevées, comme indiqué au chapitre 1, dans deux tôles ayant subi laminage à chaud, puis à froid, et recuit.

Un échantillon a été prélevé en zone utile de la tôle, et une mesure de la texture effectuée. Les figures de pôles et fonctions de distribution des orientations obtenues sont présentées respectivement aux figures C.2 et C.3.

Une texture cube apparaît nettement. Comme indiqué à l'annexe B, cette texture, encore

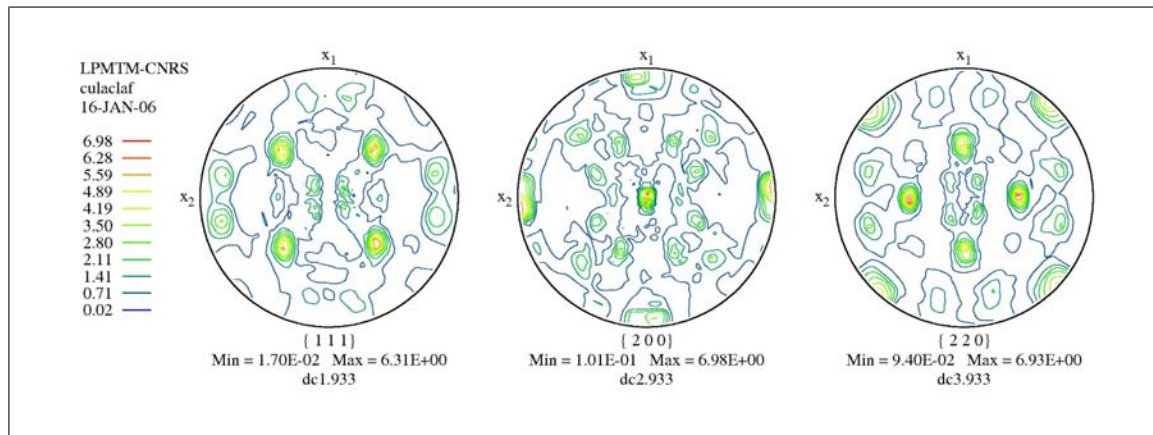


FIG. C.2 – Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud, laminé à froid, recristallisé.

appelée « texture en dé », apparaît classiquement, pour ce type de métaux, lors des étapes de recuit. Notre matériau en a subi plusieurs.

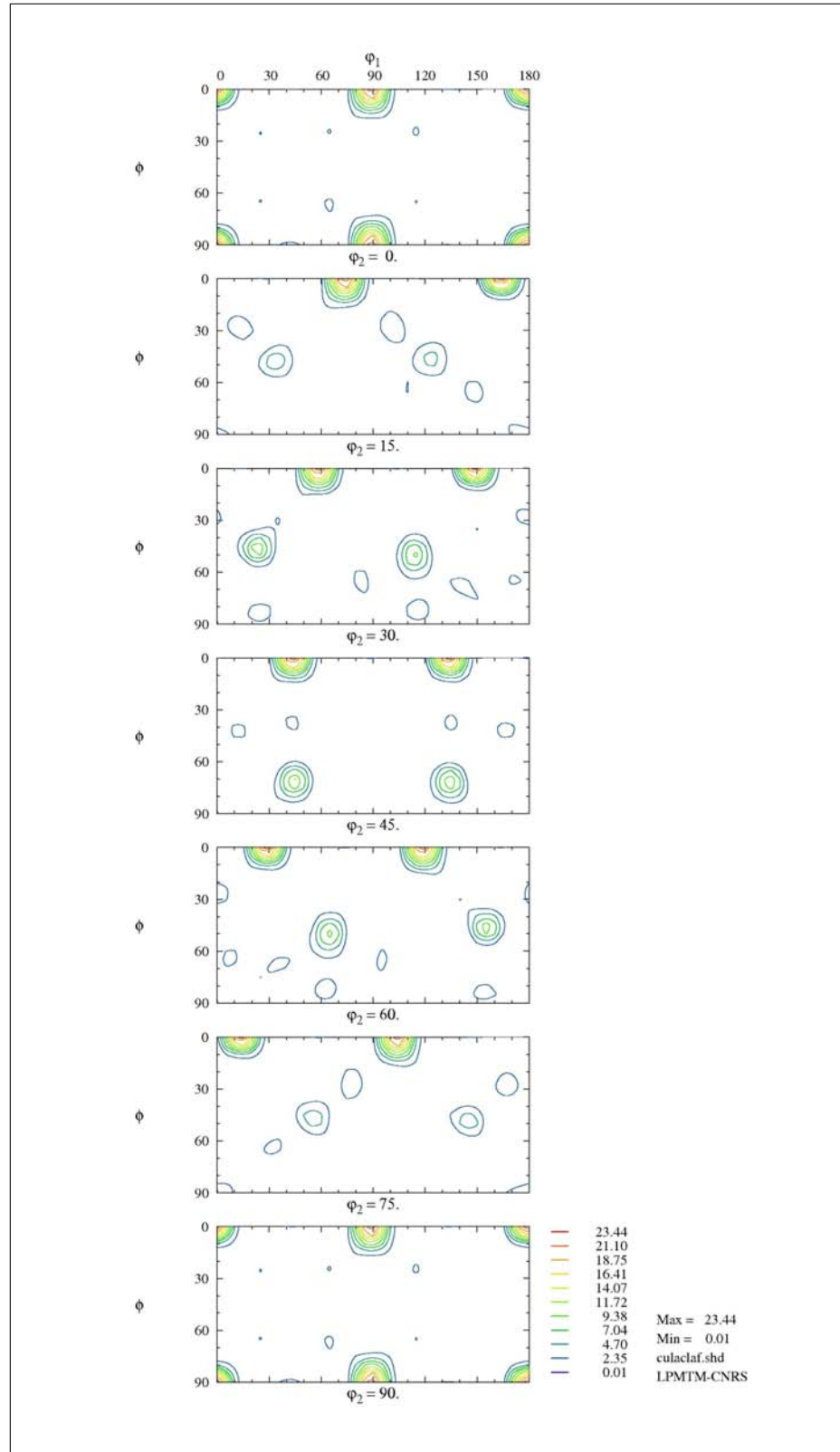


FIG. C.3 – Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud, laminé à froid, et recristallisé. Une texture cube apparaît nettement.

C.2.2 Mesure de texture sur la tôle n°2

Le chargement cyclique, à l'exception des cisaillements, nécessite au contraire des tôles épaisses pour y prélever des éprouvettes cylindriques d'un diamètre suffisant pour ne pas flamber en compression. Elles ont donc été usinées dans une tôle de 15,7 mm d'épaisseur. Celle-ci n'avait subi que le laminage à chaud.

Une première analyse de ce matériau est effectuée en vue de déterminer le type de texture ainsi que son éventuelle hétérogénéité. L'échantillon est découpé en bord de tôle afin de conserver la surface maximale pour le prélèvement ultérieur d'éprouvette de traction-compression. Le prélèvement est réalisé dans le plan (DL, DT), avec une épaisseur égale à la moitié de celle de la tôle, permettant ainsi une mesure à cœur et une autre en surface. Les figures de pôles et fonctions de distribution des orientations obtenues sont présentées respectivement aux figures C.4, C.5 et C.6.

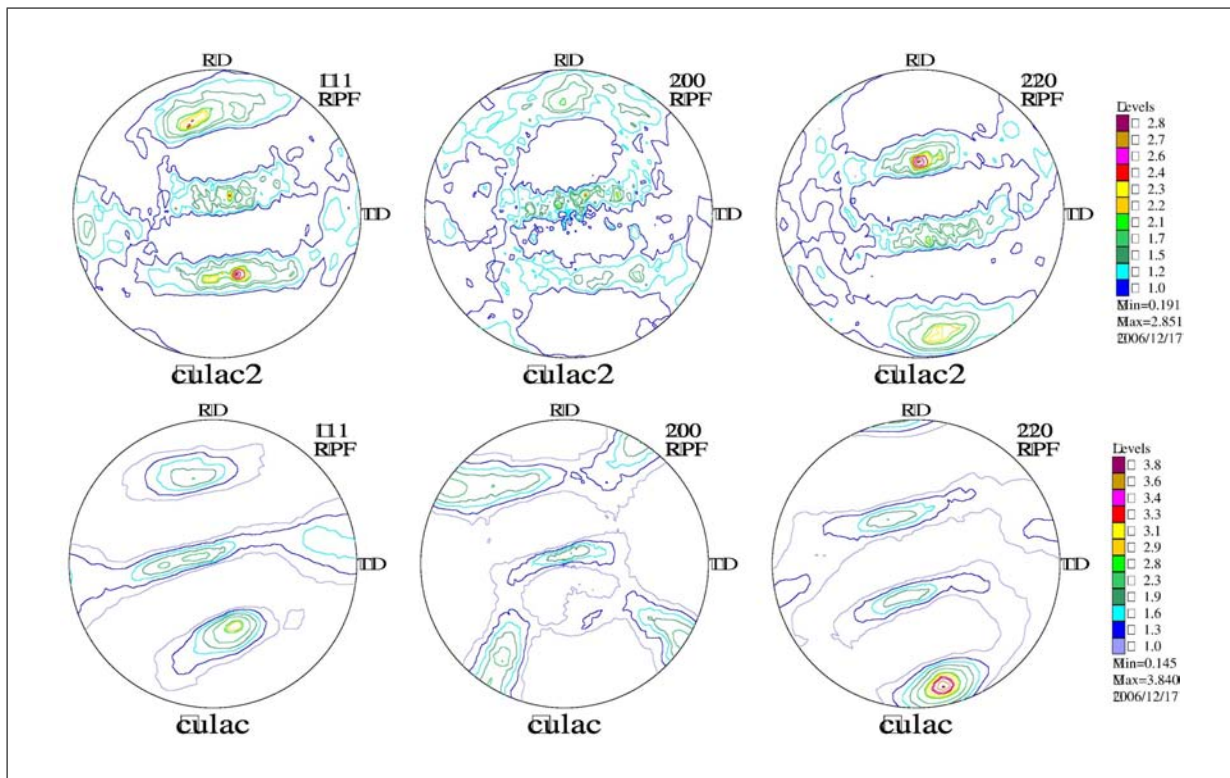


FIG. C.4 – Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud : en surface (figures du haut), et à cœur (figures du bas).

La texture de surface est particulièrement torturée, et les figures de pôle obtenues à cœur apparaissent tournée de 10°. La texture de surface importe peu dans le cadre de notre étude puisque la zone utile des éprouvettes est située à cœur de la tôle. Pour autant, la texture à cœur obtenue est peu commune pour du cuivre. En conséquence, une analyse complémentaire est effectuée.

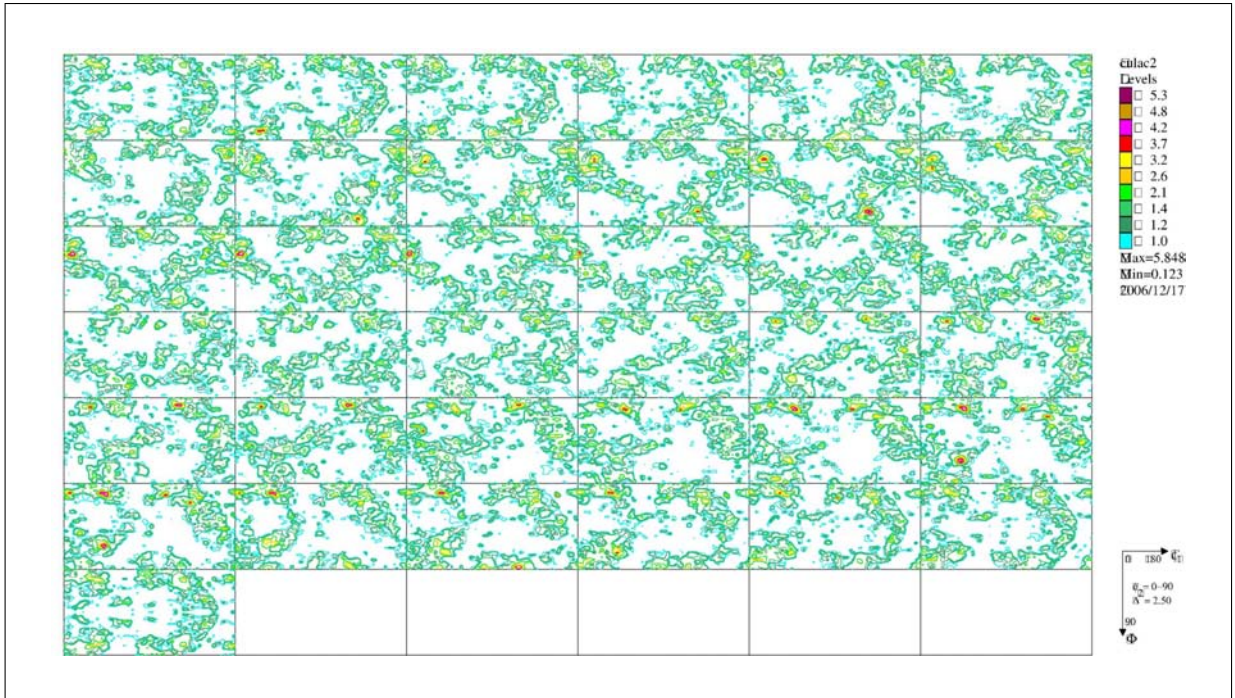


FIG. C.5 – Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud. Analyse effectuée en surface de la tôle.

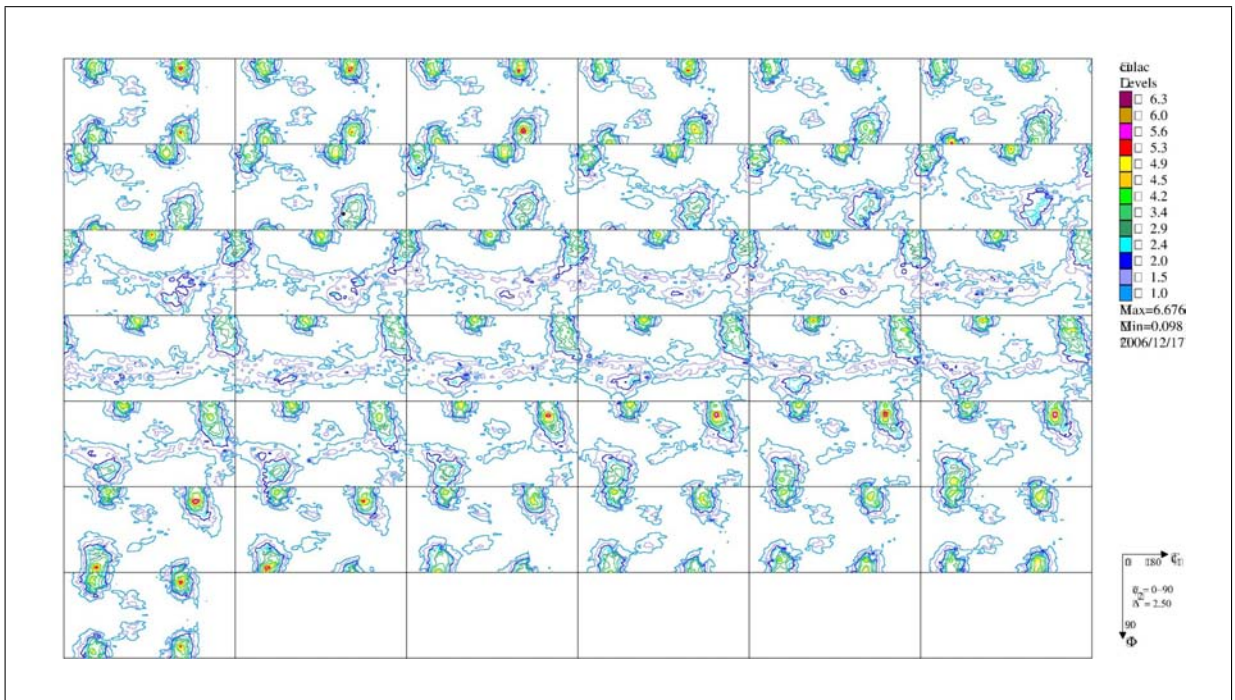


FIG. C.6 – Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud. Analyse effectuée au cœur de la tôle.

C.2.3 Analyse complémentaire de la tôle n°2

Un second échantillon est prélevé, perpendiculairement au précédent, dans le plan (DT,DN). Il permet quatre mesures :

- une mesure près de la surface,
- une seconde à cœur,
- une troisième près de l'autre surface,
- et enfin la quatrième est faite avec une translation de l'échantillon sur lui-même, constituant ainsi une moyenne des mesures.

Les résultats sont présentés figures C.7 pour les figures de pôles, et C.8, C.9, C.10, et C.11 pour les fonctions de distributions des orientations correspondantes.

Une approche qualitative de comparaison des résultats met en évidence une hétérogénéité de la texture dans l'épaisseur du matériau : une texture similaire pour les mesures 1 et 3 faites au voisinage des surfaces nommées « DN » et, une texture similaire pour les mesures 2 (à cœur) et l'intégrale des trois mesures. Par ailleurs les figures de pôles et fonctions d'orientation ainsi obtenues rappellent celles d'un matériau de type acier, avec présence d'une fibre γ .

La texture mesurée est donc assez inattendue pour un cuivre OFHC. Il convient de rappeler que ce matériau provient d'une tôle extraite directement en sortie de laminoir à chaud. Le traitement thermomécanique est donc très incomplet et atypique.

Il a déjà été observé dans la bibliographie des textures typiques de matériaux à structures cubiques à faces centrées sur des métaux de structure cubique centrée. Le phénomène inverse est ici observé. La présence de cette fibre γ pourrait être imputée à une composante de cisaillement. La tôle correspond en effet à la toute première partie du lingot entrant dans le laminoir à chaud. Or l'amorçage du laminage, avec de plus un trop fort taux de réduction, comporte quasi-inévitablement une telle composante.

Des analyses et essais complémentaires seraient nécessaires pour justifier cette hypothèse.

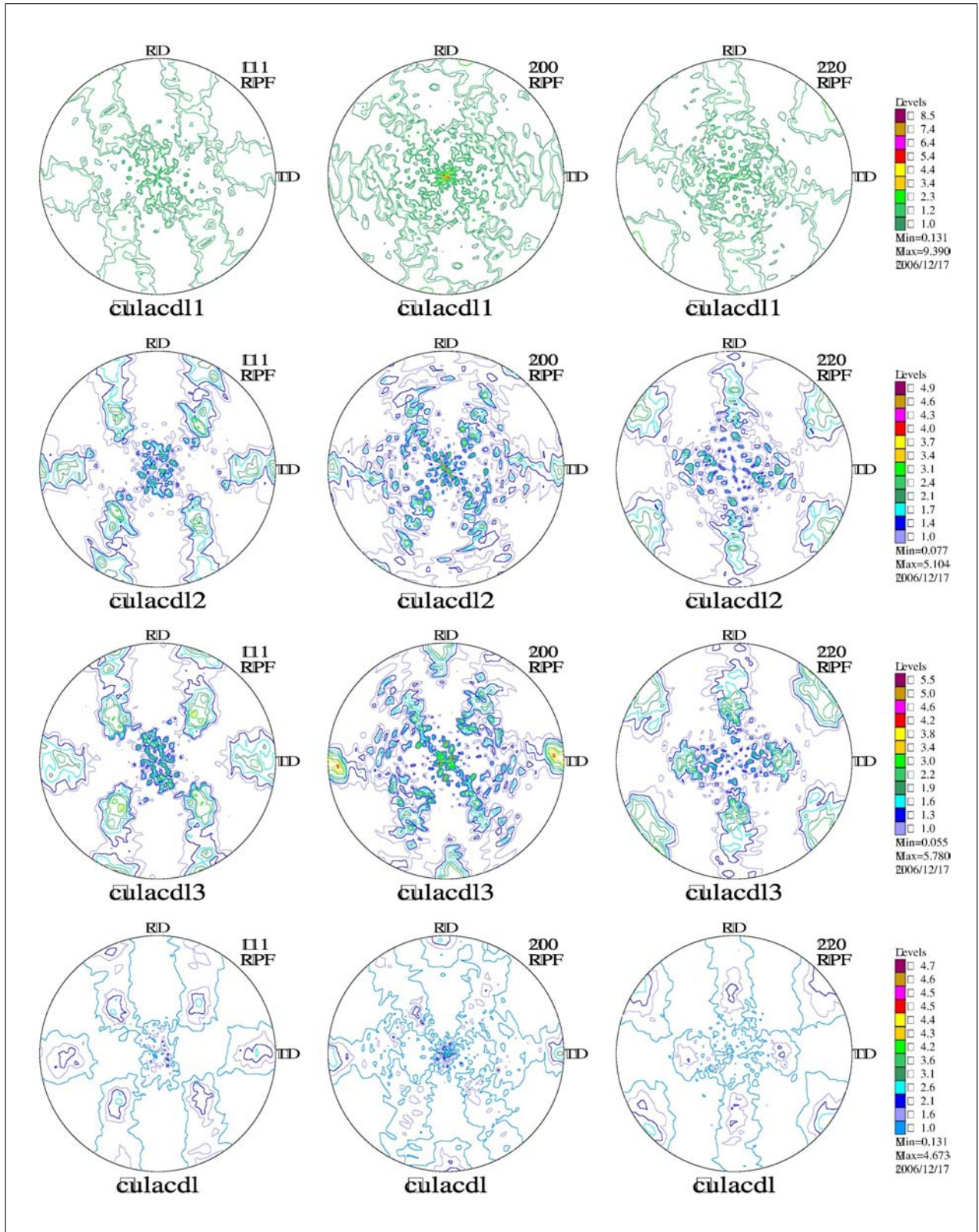


FIG. C.7 – Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud : mesures 1, 2, 3 et 4 (cette dernière correspond à l'intégrale des 3 autres).

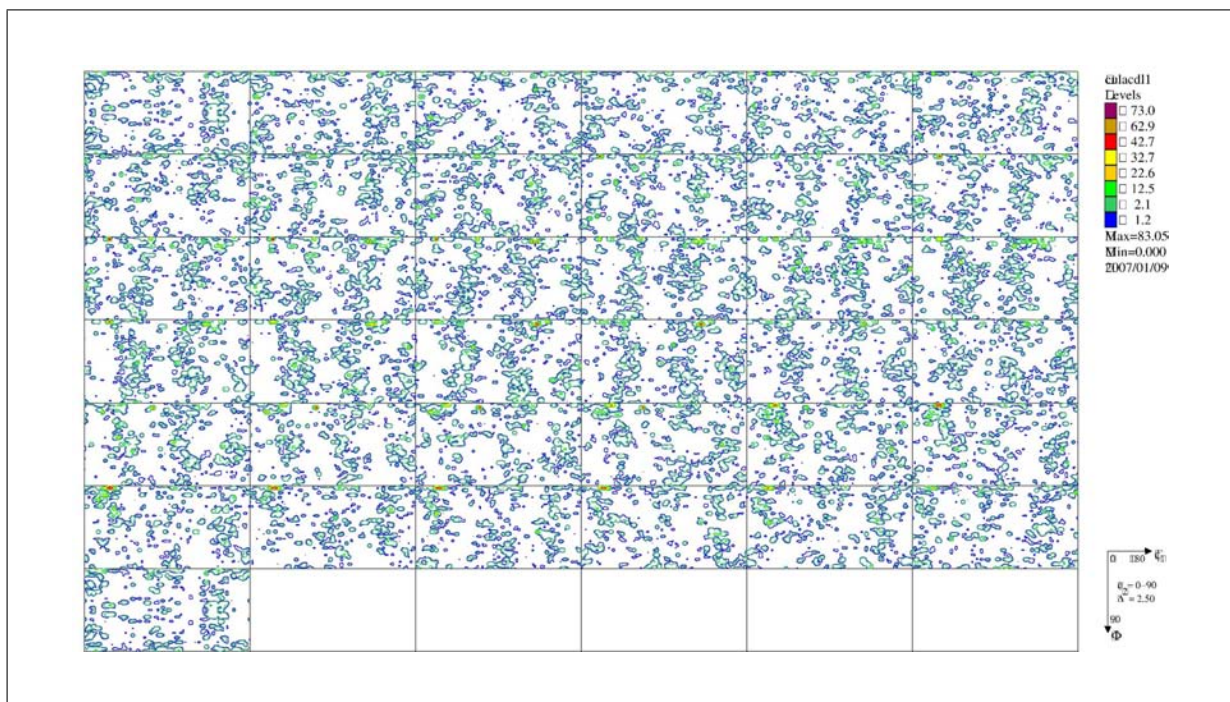


FIG. C.8 – Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 1. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée près de la surface.

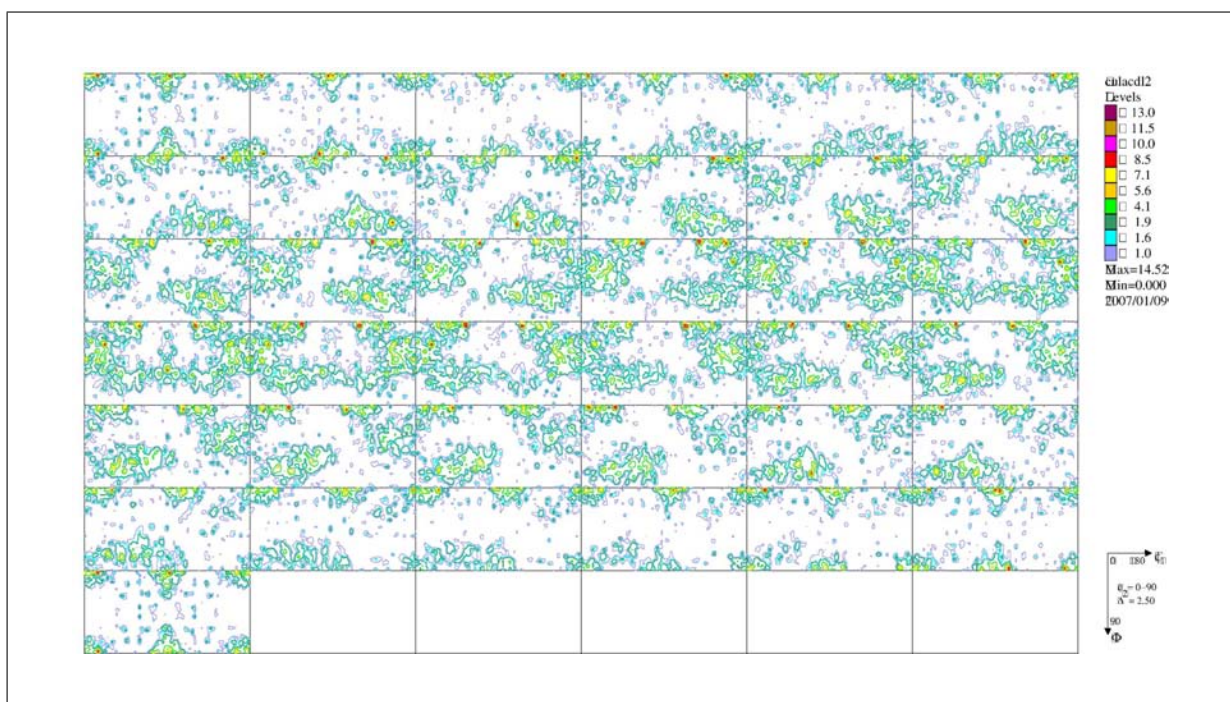


FIG. C.9 – Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 2. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée à cœur.

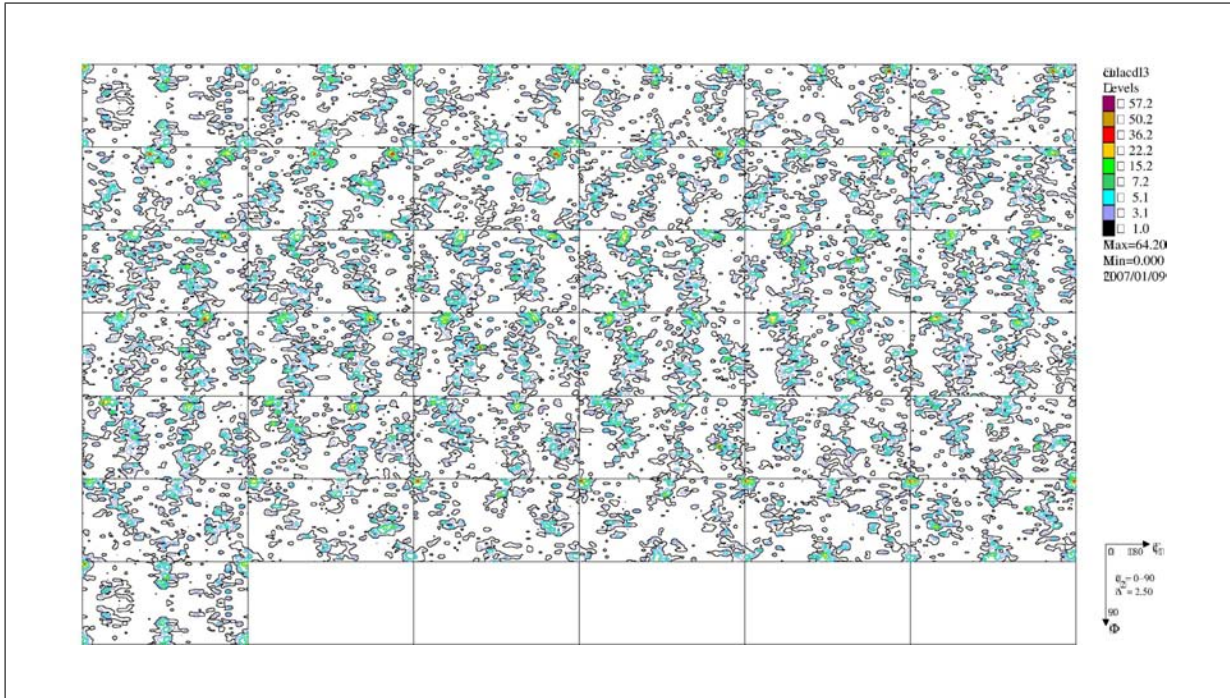


FIG. C.10 – Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 3. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée près de l'autre surface.

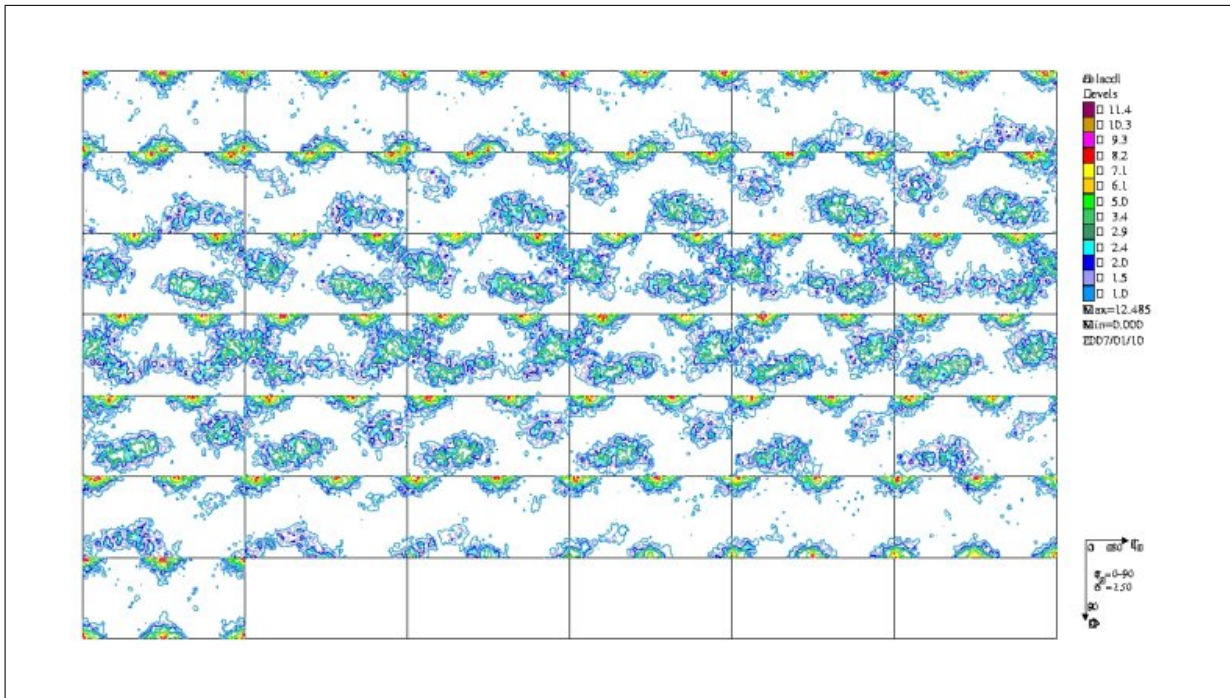


FIG. C.11 – Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 4. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée avec une translation de l'échantillon sur lui-même, constituant ainsi une moyenne des mesures.

En conclusion ...

Deux tôles de cuivre OFHC ont été utilisées pour la réalisation des essais mécaniques menés dans cette thèse. Des échantillons ont été prélevés sur chacune des tôles afin d'effectuer une analyse par diffraction aux rayons X de la texture cristallographique.

La première tôle, laminée à chaud, puis à froid et recristallisée, présente une texture cube assez marquée. Il s'agit d'une texture classique de ce métal après étapes de recuit.

La seconde n'a subi qu'un laminage très partiel. La texture en surface est torturée, et tournée de 10° . Des mesures à cœur, et en moyenne sur l'épaisseur ont été réalisées. Les figures de pôles et fonctions d'orientation indiquent la présence d'une fibre γ . Cette caractéristique est inattendue pour un cuivre. Elle est imputée au traitement thermomécanique très partiel de la tôle.

Annexe D

Analyse EBSD

"A map of the world that does not include Utopia is not worth even glancing at, for it leaves out the one country at which Humanity is always landing."
Oscar Wilde (1854-1900)

*C*ETTE ANNEXE est une présentation succincte de la technique de cartographie EBSD.
Le protocole utilisé dans cette thèse pour la réalisation et le post-traitement des cartographies EBSD est ensuite décrit.

D.1 Rappel du principe de l'EBSD

L'EBSD (Electron Back Scattered Diffraction), ou diffraction des électrons rétro-diffusés, est une technique qui permet de déterminer l'orientation cristallographique d'une zone excitée par un faisceau d'électrons incident. Il résulte de cette excitation l'émission, par chaque plan atomique de la maille, d'une paire de cônes de diffraction, qui, interceptés par un écran phosphorescent, forment une bande de Kikuchi (figure D.1). L'échantillon est généralement incliné de 70° afin d'obtenir un bon compromis entre l'émission maximale des électrons rétrodiffusés et la nécessité de limiter les effets néfastes de la rugosité résiduelle de l'échantillon.

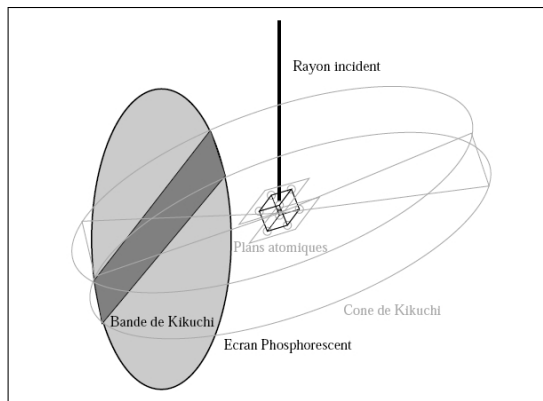


FIG. D.1 – Principe de l'EBSD : formation d'une bande de Kikuchi sur l'écran phosphorescent.

L'indexation du diagramme obtenu associe à chaque bande le plan cristallographique correspondant. Le diagramme est tout d'abord enregistré par une caméra, puis l'indexation des bandes est effectuée en temps réel à l'aide d'une transformation mathématique (transformée de Rough) de l'image numérique du diagramme. Cette indexation est enfin mise en regard d'un diagramme théorique, conduisant ainsi à l'obtention de trois angles d'Euler qui caractérisent l'orientation cristallographique. Le résultat final d'une cartographie est un fichier comportant autant d'enregistrements que de points analysés, et où chaque enregistrement contient principalement les coordonnées du point analysé, les angles d'Euler reflétant l'orientation locale, la nature de la phase détectée, ainsi que des informations annexes telles que l'indice de qualité du diagramme, ou l'indice de confiance sur l'indexation.

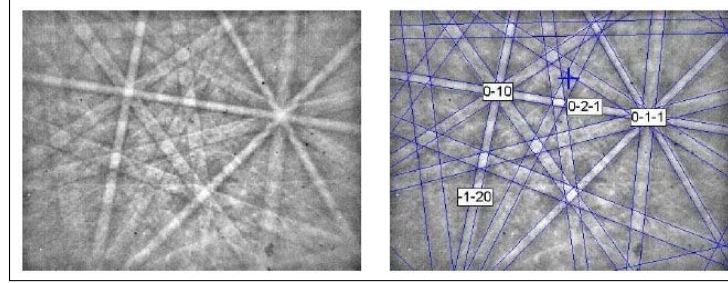


FIG. D.2 – Diagramme de Kikuchi associé à une orientation cristalline, et indexation de celui-ci.

D.2 Mesures effectuées

D.2.1 Préparation de la surface de l'échantillon

Les mesures d'orientations locales par techniques d'EBSD demandent une préparation soignée de la surface de l'échantillon. Une étape de polissage mécanique jusqu'au papier de granulométrie 2 400 au polissage à pâte diamantée (6, puis 3, et enfin 1 μm) est suivi d'un électropolissage permettant d'enlever la couche écrouie par le polissage mécanique tout en préservant l'état de surface. La solution chimique utilisée pour le cuivre est constituée de 70 % d'acide phosphorique (H_3PO_4) et de 30 % d'eau. L'échantillon est plongée dans cette solution pendant 20 secondes à 22 V.

D.2.2 Réalisation des cartographies

Des cartographies EBSD sont réalisées au centre des zones utiles de toutes les éprouvettes. Le microscope électronique à balayage utilisé est un modèle XL40 de marque Philips. La taille de spot (correspondant à la taille du faisceau d'électron incident) est choisie égale à une valeur comprise entre 5 et 6, la tension d'accélération des électrons est de 20 kV, l'échantillon est positionné à une distance de travail de 25 mm et un angle d'inclinaison de 70° pour maximiser la diffraction des électrons. La zone balayée se situe au centre des éprouvettes de traction et couvre une surface de $500 \mu\text{m} \times 500 \mu\text{m}$. Un pointé est réalisé tous les microns, le taux moyen d'indexation est ici de 97% des pointés. L'ensemble des paramètres de toutes les cartographies sont répertoriés dans les tableaux D.1, D.2, D.3.

Conditions opératoires du MEB :					
Eprouvette :	ct0	ct45	t0	t45	tc
Tension d'accélération (kV)	20				
Taille de spot (numéro du diaphragme)	entre 5 et 6				
Distance de travail (mm)	25 mm à ± 1 mm				
Grandissement	x90				
Focalisation dynamique active	oui				
Rotation du balayage	0°				
Correction d'inclinaison (tilt)	oui, 70°				

TAB. D.1 – Réglage du microscope électronique à balayage Philips XL40 utilisé pour la réalisation des cartographies EBSD.

Conditions opératoires du EBSD :					
Eprouvette :	ct0	ct45	t0	t45	tc
Temps d'intégration caméra (ms)	7	3	3	3	10
Nombre de balayages	2	3	3	3	3
Sensibilité	élevée				
Binning	8x8				
Image enhancement	statique				
Nombre de bandes	3-5				
Résolution transformé de Hough	60				

TAB. D.2 – Paramétrages des cartographies EBSD.

Cartographie :					
Eprouvette :	ct0	ct45	t0	t45	tc
Pas (μm)	1				
Largeur X (points)	977	959	962	889	976
Largeur Y (points)	998	1007	970	887	908
Temps de traitement par pixel (ms)					55
Taux d'indexation	97 %	98 %	96 %	97 %	91,5 %

TAB. D.3 – Résultats statistiques des cartographies EBSD obtenues.

D.2.3 Post-traitement des données

A l'issue d'une cartographie EBSD, il est nécessaire d'effectuer un post-traitement. En effet, tous les pointés ne peuvent être correctement indexés, soit parce que deux diagrammes de Kikuchi se superposent, comme c'est le cas aux joints de grains, soit parce que le relief local de l'échantillon est trop important. Compte tenu du matériau étudié (absence de quadraticité), et de la bonne indexation, seulement trois étapes de post-traitement ont été nécessaires (voir par exemple [National de Microscopie Electronique Balayage et de Microanalyses, 2004], [Héripré, 2006] pour une analyse plus détaillée). La première consiste à attribuer aux points non indexés l'orientation cristallographique la plus appropriée. La seconde étape permet de supprimer les points isolés ainsi que les zones de même orientation cristallographique dont la surface est inférieure à celle couverte par au moins trois pointés. Enfin, troisième étape, une fois les joints de grains définis en utilisant une règle de désorientation minimale de 13° , chaque grain se voit affecter son orientation moyenne.

D.3 Analyse des résultats : morphologie

Le fait de disposer d'une cartographie du matériau permet d'effectuer une analyse morphologique de la microstructure, ou plus précisément une analyse statistique de la morphologie des grains. Une première observation purement qualitative indique que cette microstructure est fortement maclée, qu'elle présente une forte hétérogénéité de taille de grains, ceux-ci étant par ailleurs fréquemment de forme non convexe.

Données statistiques. Trois paramètres ont été retenus pour l'analyse statistique de la morphologie : la surface des grains, leur allongement, et leur orientation morphologique. L'allongement s'exprime par le rapport du grand axe c sur le petit axe a de l'ellipse équivalente (ellipse de même aire, même centre et même orientation morphologique que la forme étudiée). L'orientation morphologique est l'angle α que fait le grand axe de l'ellipse équivalente avec l'horizontale. Pour être plus complet, il conviendrait de caractériser également la non-convexité des grains.

Les résultats obtenus, pour la microstructure du cuivre laminé à chaud (*i.e* celle qui a donné lieu à microstructure synthétique) sont présentés aux figures D.7, et D.8.

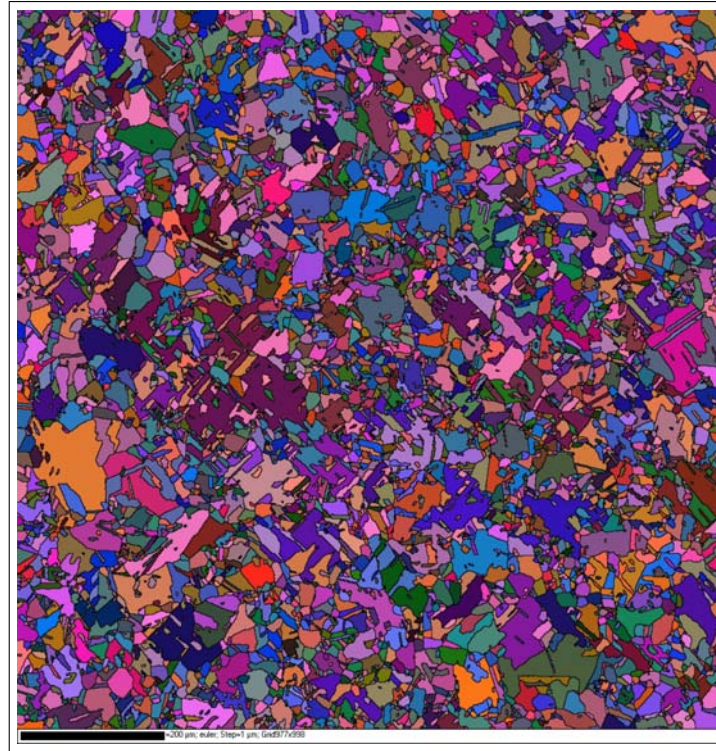


FIG. D.3 – Cartographie EBSD d’une surface d’1 mm^2 sur la tôle n°1, *i.e.* le cuivre laminé à chaud, puis à froid, et recristallisé (essai cisaillement-traction à 0°).

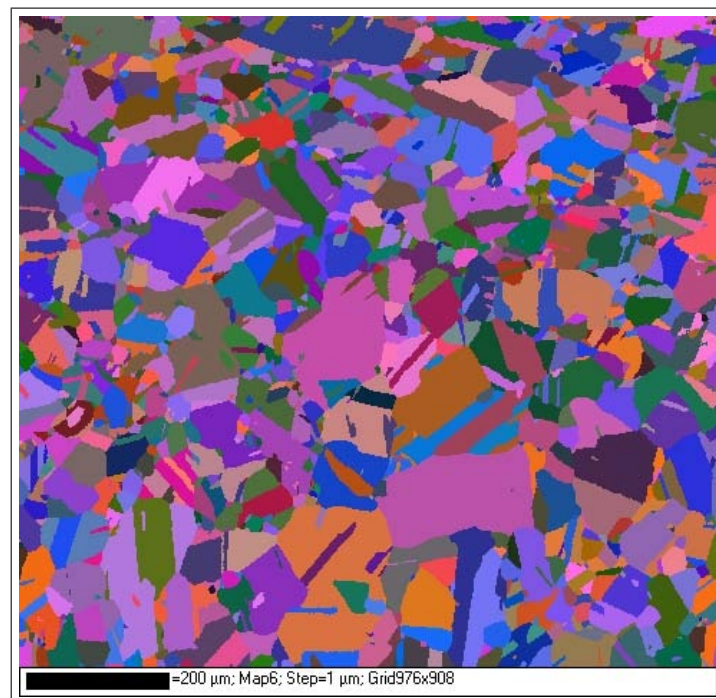


FIG. D.4 – Cartographie EBSD d’une surface d’1 mm^2 sur la tôle n°2, *i.e.* le cuivre laminé à chaud uniquement (essai cyclique).

Les macles. Deux cristaux sont en position de macle si de part et d'autre de leur plan commun (dit plan de macle ou de composition) subsiste un réseau de maille multiple de celle qui leur est propre [Jaoul, 1965]. Ceci implique des relations de symétrie particulière. Les macles sont des défauts dans l'ordre d'empilement des couches denses d'atomes. La partie maculée du cristal est l'image miroir de la partie non maculée, le plan de maillage faisant office de plan miroir (voir figure D.3).

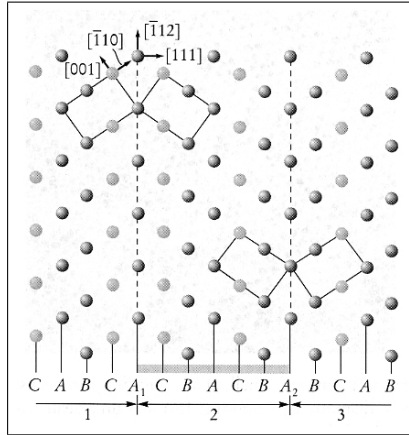


FIG. D.5 – Représentation schématique d'une macle dans le réseau c.f.c. Le plan de la figure est le plan (110). Les plans A_1 et A_2 sont des plans de maillage [Baïlon et Dorlot, 2000].

Il faut considérer deux types de macles qui diffèrent par leur mode de formation. Les macles de croissance se forment au cours de la recristallisation du métal, généralement à partir d'un défaut d'empilement. Si deux cristaux poussent en position de macle, leur joint est stable car son énergie est faible. Ces macles de croissance ont généralement des bords parallèles et droits D.3. Des traitements de longue durée à température élevée augmentent la proportion de cristaux en position de macle. Les macles de déformation, ou macles mécanique, apparaissent sous l'effet d'une contrainte. Les atomes de la partie maculée se déplacent parallèlement à une direction η_1 (direction de cisaillement) du plan de maillage, proportionnellement à leur distance à ce plan. Ces macles ne seront pas étudiées ici car les chargements mis en œuvre n'engendrent pas de maillage de déformation.

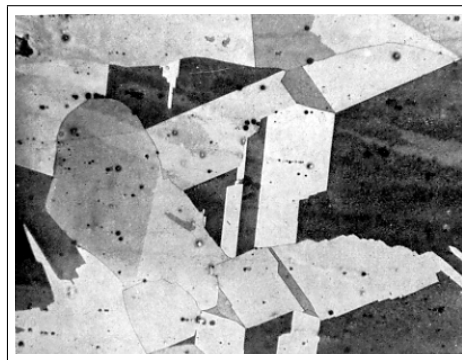


FIG. D.6 – Macles de croissance dans le cuivre [Jaoul, 1965].

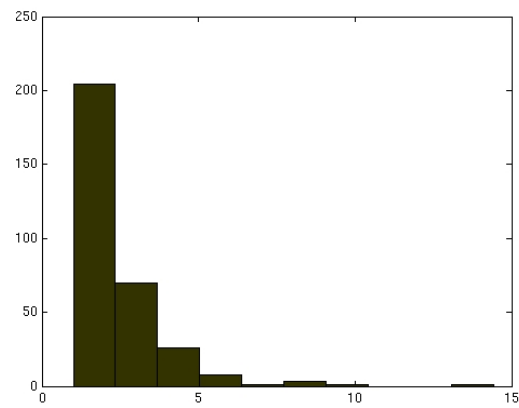


FIG. D.7 – Analyse de la cartographie EBSD effectué sur le cuivre laminé à chaud, sur une surface de $500 \mu m^2$. Allongement des grains (rapport du grand axe sur le petit axe de l'ellipse équivalente).

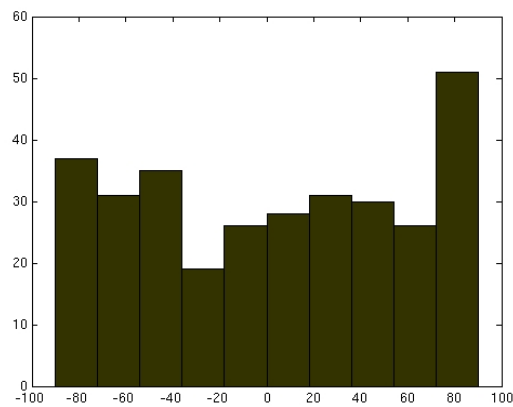


FIG. D.8 – Analyse de la cartographie EBSD effectué sur le cuivre laminé à chaud, sur une surface de $500 \mu m^2$. Orientation morphologique des grains (en $^{\circ}$).

_____ *En conclusion ...*

Des cartographies EBSD ont été réalisées sur chacune des éprouvettes, sur une surface d'un mm² environ, au centre de la zone utile. Les deux tôles de cuivre présente une micro-structure ayant une assez forte disparité de taille de grains. De plus, la morphologie des grains est essentiellement caractérisée par une fréquente non-convexité.

La proportion de macles est grandes. C'est une caractéristique classique du cuivre. Il s'agit de macles de recuit.

Annexe E

Utilisation des transformées de Radon dans l'analyse de microstructures

« Tant de mains pour transformer ce monde, et si peu de regards pour le contempler ! »

Julien Gracq (1910-2007) *Lettrines*

CETTE ANNEXE est un très bref rappel sur la transformée de Radon, laquelle a été utilisée pour la détection des parallélismes dans une cartographie EBSD afin d'isoler les macles et donc de leur appliquer un traitement spécifique.

E.1 Détection des parallélismes : la transformée de Radon

Tout l'intérêt de la transformée de Radon dans l'analyse d'images réside dans le fait qu'elle permette de localiser une droite dans une image, même très bruitée, comme le montre la figure E.1.

Pour une présentation complète de cette transformée, se reporter à [Natterer, 1986], l'objet de cette annexe se limitant à une brève présentation de l'utilisation ici faite.

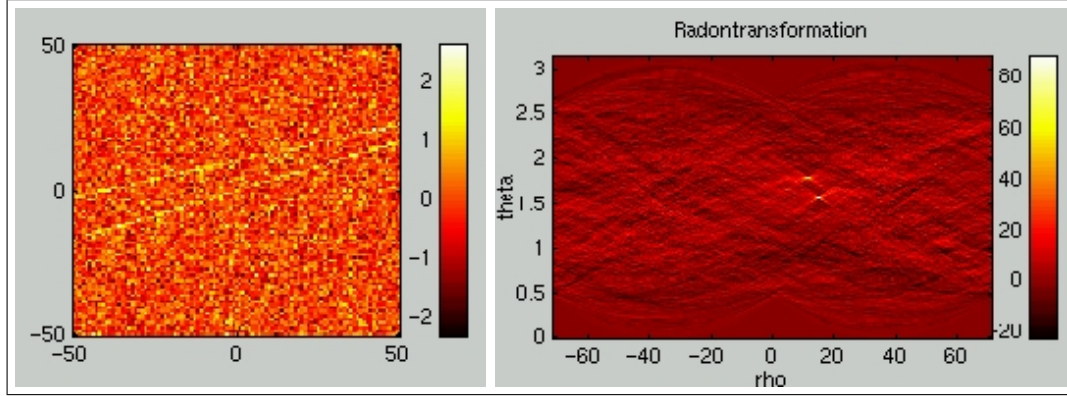


FIG. E.1 – Une droite du domaine spatial se traduit dans l'espace de Radon par un point. Les deux droites de l'image de gauche, qui est fortement bruitée, apparaissent sous la forme de deux points lumineux dans l'espace de Radon présenté à droite [Toft, 1996].

Soient (x, y) les coordonnées cartésiennes d'un point dans un espace bi-dimensionnel, $f(x, y)$ une fonction continue. La transformée de Radon de $f(x, y)$, notée $R_f(\rho, \theta)$, est définie par la relation suivante :

$$R_f(\rho, \theta) = \iint f(x, y) \delta(\rho - x \cos \theta - y \sin \theta) dx dy. \quad (\text{E.1})$$

La transformée de Radon permet notamment la localisation d'une droite. En effet, une droite peut être modélisée par l'équation :

$$f(x, y) = \delta(\rho^* - x \cos \theta^* - y \sin \theta^*). \quad (\text{E.2})$$

La transformée de Radon de la fonction $f(x, y)$ s'écrit :

$$R_f(\rho, \theta) = \iint f(x, y) \delta(\rho - x \cos \theta - y \sin \theta) dx dy, \quad (\text{E.3})$$

$$R_f(\rho, \theta) = \iint \delta(\rho^* - x \cos \theta^* - y \sin \theta^*) \delta(\rho - x \cos \theta - y \sin \theta) dx dy \quad (\text{E.4})$$

La transformation de Radon d'une droite, de paramètres (ρ^*, θ^*) , est, dans l'espace de Radon, un Dirac sur $[\rho^*, \theta^*]$. Ainsi, il est possible d'estimer les paramètres d'une droite à partir de la transformation de Radon d'une image (voir figure E.2). Deux droites parallèles auront la même valeur de θ^* dans l'espace de Radon.

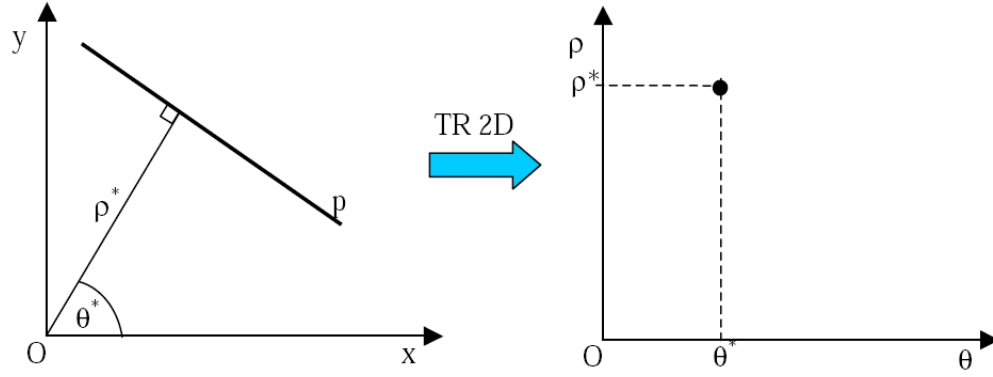


FIG. E.2 – Droite dans le domaine spatial et dans l'espace de Radon [Barva, 2003].

E.2 Mise en œuvre dans l'analyse de notre microstructure

Détecter toutes les droites, puis tous les parallélismes de l'image étudiée pourrait s'avérer fort coûteux en temps de calcul et peu utile car nécessitant par la suite un traitement important. A titre d'exemple, la figure E.3 montre l'exemple d'une macule sur laquelle la détection de toutes les droites a été réalisée.

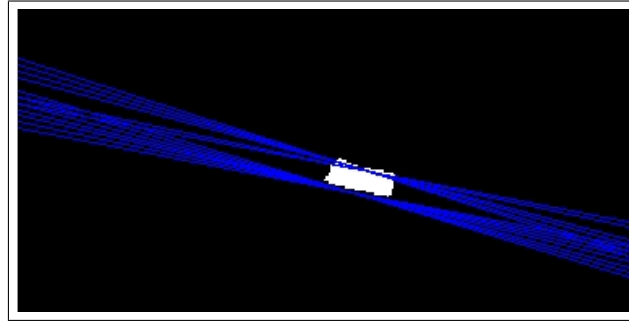


FIG. E.3 – Détection par transformée de Radon de toutes les droites de l'image d'une macule.

Compte tenu du fait qu'il est peu fréquent qu'une macule ait un rapport d'allongement égal à 1, il a été ici décidé de ne détecter que les droites dont la direction était parallèle à l'axe de plus grande projection de la forme étudiée, c'est-à-dire la macule.

De plus, une macule n'ayant, dans la réalité, pas des bords strictement parallèles, une tolérance angulaire a été définie pour la détection du parallélisme. Cette tolérance est ici fixée à 10° .

Par ailleurs, pour éviter les artefacts consistant à détecter un parallélisme reposant sur quelques pixels, un seuil minimal reposant sur la longueur l du segment pris en compte dans un parallélisme est imposé. Ce seuil est défini comme suit :

$$l > \frac{p}{2,3} \quad (\text{E.5})$$

où p est la longueur de l'axe de plus grande projection de la macule.

En conclusion ...

La transformée de Radon permet de localiser et de définir une droite dans un espace bidimensionnel. Nous l'avons utilisée en analyse morphologique pour détecter les segments parallèles dans une cartographie EBSD. Ceci a permis d'isoler les macles par une autre caractéristique que la cristallographie, difficile d'exploitation dans le cas de cette microstructure.

Tables et Index

Table des matières

Remerciements	ix
Avant-Propos	1
Introduction	5
I <i>Le monocristal</i>	9
1 Analyse bibliographique	11
1.1 Etat de l'art	13
1.1.1 Les interactions entre dislocations	13
1.1.2 Prise en compte dans les modèles de comportement monocristallin	15
1.2 Orientation retenue	18
1.3 Lois monocristallines étudiées et identifications antérieures	18
1.3.1 Définitions généralement communes aux modèles de plasticité cristalline.	20
1.3.2 Approche quasi-physique : le modèle de Tabourot-Teodosiu	20
1.3.3 Approche micromécanique phénoménologique : le modèle de Méric et Cailletaud.	22
1.3.4 Parallèle formel entre les lois de Tabourot et de Méric-Cailletaud	24
2 Interactions entre systèmes de glissement	27
2.1 Mise en œuvre expérimentale	29
2.1.1 Caractérisation de la texture	29
2.1.2 Réalisation des essais	29
2.2 Méthode d'identification proposée	33
2.2.1 Définition générale de la méthode	33
2.2.2 Pré-identification par modèle à champs moyens	34
2.3 Validation et ajustement par calculs éléments finis	36
2.3.1 Conditions aux limites appliquées	36
2.3.2 Microstructure développée	38
2.3.3 Définition du chargement et validation de l'identification	41
2.4 Résultats obtenus	42
2.4.1 Rappel des lois monocristallines étudiées	42
2.4.2 Résultats de l'identification	44

2.4.3	Analyse des jeux de paramètres obtenus	44
2.4.4	Comparaison des simulations avec modèles à champs moyens	48
II La localisation de la déformation :		
<i>une échelle médiane</i>		53
3	Analyse bibliographique	55
3.1	Corrélation d'images sous MEB	58
3.1.1	Les différents marquages	58
3.1.2	Les coefficients de corrélation	59
3.1.3	Approximation de la transformation matérielle	61
3.1.4	Interpolation du coefficient de corrélation discret	62
3.1.5	Le calcul des déformations	62
3.1.6	Incertitudes	62
3.2	Génération des microstructures représentatives	66
3.2.1	Importance de la troisième dimension	66
3.2.2	Microstructure réelle	66
3.2.3	Microstructures synthétiques statistiquement représentatives	68
3.2.4	Microstructures réelle en surface, et synthétique en volume	68
3.3	Etude de la localisation de la déformation	70
3.3.1	Analyse en grandes transformations	70
3.3.2	Faible déformation, apparition de la localisation	70
3.3.3	Couplage mesures de champs / calculs éléments finis en vue d'identifier la loi de comportement monocristallin	71
3.4	Orientations choisies	71
4	Localisation de la déformation	75
4.1	Analyse du schéma de localisation	77
4.1.1	Réalisation des essais	77
4.1.2	Cartographie EBSD	77
4.1.3	Mesures de champs par corrélation d'images numériques acquises sous MEB	78
4.1.4	Résultats et analyse	79
4.2	Evolution de la localisation sous chargements cycliques	85
4.2.1	Réalisation des essais	85
4.2.2	Mesures de champs par corrélation d'images numériques acquises sous MEB	85
4.2.3	Difficultés rencontrées	86
4.2.4	Définition du chargement	86
4.2.5	Résultats et analyse	86
4.3	Représentation numérique de la microstructure	96
4.3.1	Cartographie EBSD et post-traitements	97
4.3.2	Première couche de grains : analyse et traitement de la surface	99

4.3.3	Définition du volume de la microstructure	102
4.3.4	Résultat obtenu	102
III Comportement polycristallin : échelle du VER		107
5	Analyse bibliographique	109
5.1	Analyse bibliographique	111
5.1.1	Homogénéisation : rappel de la méthodologie	111
5.1.2	Notion de VER et approche par éléments finis	112
5.1.3	Quelles conditions aux limites?	112
5.1.4	Estimation en champs moyens : rapide revue des principaux modèles . .	115
5.1.5	Evaluation des modèles.	121
5.2	Axes privilégiés	122
6	Evaluation numérique de modèles à champs moyens	125
6.1	Définition du comportement de référence	127
6.1.1	Essai macroscopique cyclique	127
6.1.2	Identification des paramètres de la loi monocristalline	127
6.1.3	Mise en œuvre des calculs éléments finis	130
6.2	Description VER en calculs éléments finis	134
6.2.1	Analyse à l'échelle globale	134
6.2.2	Analyse en moyenne par phase	134
6.2.3	Analyse locale	139
6.3	Analyse de modèles à champs moyens	139
6.3.1	Rappel des modèles étudiés	139
6.3.2	Procédure	141
6.3.3	Résultats et analyse	141
6.3.4	Echelle macroscopique	141
6.3.5	Echelle locale	142
Conclusion		149
Conclusions générales et perspectives		149
<i>Le travail effectué</i>		149
<i>Prolongements possibles</i>		152
<i>Perspectives</i>		154

<i>Bibliographie</i>	159
<i>Annexes</i>	173
A Le modèle de Tabourot avec écrouissage cinématique	173
B Principales caractéristiques du cuivre	177
B.1 Caractéristiques générales physico-chimiques	179
B.2 Mode de déformation	180
B.3 Les textures du cuivre	182
B.4 Traitements thermomécaniques	184
B.5 Tôles utilisées dans le cadre de cette thèse	186
C Mesures de texture par DRX	189
C.1 Mesure de texture par diffraction aux rayons X	191
C.1.1 Caractérisation de la texture cristallographique	191
C.1.2 Mesure de la texture	192
C.2 Mesures de texture effectuées	193
C.2.1 Mesure de texture sur la tôle n°1	194
C.2.2 Mesure de texture sur la tôle n°2	197
C.2.3 Analyse complémentaire de la tôle n°2	199
D Analyse EBSD	205
D.1 Rappel du principe de l'EBSD	207
D.2 Mesures effectuées	208
D.2.1 Préparation de la surface de l'échantillon	208
D.2.2 Réalisation des cartographies	208
D.2.3 Post-traitement des données	210
D.3 Analyse des résultats : morphologie	210
E Utilisation des transformées de Radon dans l'analyse de microstructures	215
E.1 Détection des parallélismes : la transformée de Radon	217
E.2 Mise en œuvre dans l'analyse de notre microstructure	218
<i>Tables et Index</i>	223
Table des matières	226
Liste des tableaux	228
Table des figures	235
Principales notations et abbréviations	237
Index	239

Liste des tableaux

1.1	Notation de Schmid et Boas [Schmid et Boas, 1935] permettant de repérer les systèmes de glissement. Pour chaque système, la lettre indique le plan de glissement tandis que le chiffre désigne le vecteur de Burgers.	13
1.2	Classement des interactions selon Basinski et Basinski [Basinski et Basinski, 1979], et Franciosi [Franciosi <i>et al.</i> , 1980]. Analyses conduites pour des matériaux à structures cristallographiques cubiques à faces centrées. Les travaux de Franciosi ici indiqués portent sur du cuivre. Basinski et Basinski effectuent une synthèse des données bibliographiques obtenues essentiellement sur du cuivre pur en glissement simple.	14
1.3	Coefficients adimensionnels proposés respectivement par Madec et Devincre pour la matrice d'interaction des structures cubiques à faces centrées. Ces coefficients ont été obtenus à l'aide de simulations par dynamique des dislocations.	18
1.4	Paramètres identifiés par Tabourot sur monocristaux de cuivre : a) [Tabourot <i>et al.</i> , 1997], b) [Tabourot, 2001].	22
1.5	Paramètres identifiés par Méric [Méric <i>et al.</i> , 1994] sur monocristaux de cuivre sous chargement cyclique.	24
1.6	Dans sa simulation de traction sur cuivre en grande déformation, Musienko [Musienko, 2005] a conservé les paramètres d'élasticité et de viscosité de Méric [Méric <i>et al.</i> , 1994], et adapté ceux des écrouissages isotropes et cinématiques.	24
2.1	Paramètres d'utilisation des clinquants lors des essais de pré-cisaillement. . . .	31
2.2	Coefficients de la loi de Tabourot et al. [Tabourot <i>et al.</i> , 1997] identifiés sur courbes expérimentales.	46
2.3	Coefficients, identifiés sur courbes expérimentales, de la loi phénoménologique cristalline Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991].	46
2.4	Comparaison entre les coefficients identifiés respectivement pour les lois de Tabourot-Teodosiu et de Méric-Cailletaud. Pour les raisons indiquées dans le cadre de la confrontation analytique des modèles présentée au chapitre 1, h^s est ici comparé à $\xi * (a^{sp})^2$, où ξ est une constante égale à 10.	47
2.5	Comparaison entre les rapports de chacun des coefficients d'interaction avec celui de la formation des verrous de Lomer. D'après l'analyse présentée au chapitre 1, le carré des coefficients des lois quasi-physiques est comparé aux coefficients eux-mêmes pour la loi phénoménologique. Se reporter au tableau 1.3 (p.18) pour les valeurs des coefficients proposés par Madec et Devincre. . .	47

3.1	Incertitude sur la mesure de transformation à partir de la mesure de déplacement, d'après [Doumalin, 2000]. Les schémas d'intégration sont rappelés à la figure 3.4.	65
6.1	Loi monocristalline Méric-Cailletaud. L'écoulement $\dot{\gamma}^s$ est de type Norton viscoplastique à seuil. L'écrouissage cinématique non linéaire x^s est décrit à l'aide d'une variable interne α^s . L'écrouissage isotrope r^s dépend d'une capacité de durcissement Q et d'une matrice d'écrouissage h^{sr} décrivant les interactions entre systèmes de glissement. Cette loi est dite phénoménologique cristalline [Méric et Cailletaud, 1991].	129
6.2	Coefficients de la loi monocristalline phénoménologique Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991] identifiés sur courbe expérimentale de chargement cyclique traction-compression.	129
6.3	Application du critère (6.2) à 2, 3, 5, 10, 20, 30, 40 et 50 réalisations prises au hasard parmi les 50 calculs effectués.	136
6.4	Formulation des lois d'interaction étudiées [Kröner, 1961], [Berveiller et Zaoui, 1979], [Pilvin et Cailletaud, 1990].	141
B.1	Nuances du cuivre [Gerber, 2002].	179
B.2	Propriétés physiques des cuivres électrolytiques (données Griset).	180
B.3	Propriétés mécaniques des cuivres électrolytiques (données Griset).	181
B.4	Principales orientations utilisées pour la description des textures ; dans l'espace d'Euler réduit, chaque orientation peut apparaître à trois positions différentes pour respecter les symétries cubique et orthotrope (d'où les différents triplets d'angles proposés).	183
D.1	Réglage du microscope électronique à balayage Philips XL40 utilisé pour la réalisation des cartographies EBSD.	209
D.2	Paramétrages des cartographies EBSD.	209
D.3	Résultats statistiques des cartographies EBSD obtenues.	209

Table des figures

1	Modélisation multi-échelle : des atomes individuels à la cuve de réacteur. [Baron et le PERFECT Consortium, 2004]	4
2	Représentation schématique des possibilités de simuler et d'observer le comportement plastique d'un volume de matière de taille donnée pendant un temps physique (dans le cas des simulations dynamiques). Les frontières tracées en traits pleins représentent les limites de validité des modèles. Les pointillés montrent les limites actuelles imposées par la puissance des calculateurs. [Fivel, 2006].	6
3	Il eût été intéressant de pouvoir écrire ce manuscrit en trois dimensions : l'axe x pour les échelles, l'y pour les chargements, et le z pour l'approche utilisée. Cette mise en œuvre n'étant pas encore à l'ordre du jour, il a bien fallu se résoudre à en choisir un ... La progression des échelles a ici été privilégiée : systèmes de glissement pour la première partie, la bande de localisation dans la seconde, et enfin le VER.	8
1.1	« Lames minces » extraites selon [111] d'une simulation de traction selon l'axe [100] sur monocristal. Les simulations réalisations avec une même densité de dislocations initiales. En l'absence de glissement dévié, l'organisation de la microstructure est peu perceptible ; avec glissement dévié, l'ébauche d'organisation est plus nette [Madec, 2001].	16
1.2	Matrice d'interaction des systèmes de glissement pour une structure cubique face centrée, issue de [Franciosi, 1984]. La famille de systèmes de glissement est $\{110\} < 111 >$.	19
1.3	Valeurs des coefficients d'interaction écrit sous la forme provenant de l'équation de Taylor ($\tau = \mu b \sqrt{\rho}$), en fonction de la densité des arbres de la forêt pour les quatre types d'interactions entre systèmes de glissement [Devincere et al., 2006].	19
2.1	Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud, puis à froid, et recristallisé.	29
2.2	Schéma d'équivalence du chargement composé d'un pré-cisaillement suivi d'une traction après rotation de 45° .	30
2.3	(a) Géométrie de l'éprouvette utilisée pour le pré-cisaillement, avec schéma de découpe des petites éprouvettes de traction. (b) Photo des mors utilisés pour guider les zones utiles de l'éprouvette lors du cisaillement, et ainsi éviter le flambement.	32

2.4	(a) Photo de la machine de traction <i>in situ</i> du LMS. (b) Géométrie de l'éprouvette de traction prélevée dans une tôle de cuivre OFHC de 0,5 mm d'épaisseur.	32
2.5	(a) Champ de déformation mesuré par corrélation d'images à l'issue du pré-cisaillement, à l'aide d'une grille d'un pas de 2 mm sérigraphiée à la surface de l'éprouvette. Il permet de prélever les éprouvettes de traction dans une zone de pré-déformation homogène. (b) Courbes d'écrouissage des différentes tractions effectuées : avec ou sans pré-cisaillement, à 0° ou 45° de la direction de laminage du matériau. Le déplacement est mesuré avec un extensomètre à couteaux de base de mesure 14 mm, et la force grâce à la cellule de la machine. Les tractions ont été réalisées sur la machine de traction <i>in situ</i> du LMS.	33
2.6	Mise en données du chargement cisaillement puis traction à 0° dans le module « Simulation » du code Zébulon.	36
2.7	Procédure de pré-identification des paramètres de la loi monocristalline.	37
2.8	Maillage tri-dimensionnel périodique utilisé pour la validation de l'identification par calcul éléments finis. La géométrie est composée de polyèdres de Voronoï non coupés. Le maillage respecte les joints de grains. Les éléments utilisés (c3d10) sont tétraédriques quadratiques.	38
2.9	Remaillage de la moitié de la surface pour s'assurer des conditions de périodicité sur le maillage.	40
2.10	Comparaison des figures de pôles des textures cristallographiques simplifiées et complètes pour les plans {111} et {220}.	40
2.11	Découpage en sous-domaines respectant les joints de grains (ici sur un maillage non périodique [Osipov, 2007]).	41
2.12	Procédure de validation de l'identification des paramètres de la loi monocristalline.	43
2.13	Identification par calcul éléments finis des lois monocristallines de Tabourot [Tabourot <i>et al.</i> , 1997], et de Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991].	45
2.14	Estimation du comportement obtenue, pour les deux lois monocristallines, avec la règle en β , le modèle de Kröner, et l'estimation par linéarisation affine (formulation viscoplastique).	50
3.1	Principe de la méthode de corrélation.	60
3.2	Principe du marquage par microélectrolithographie [Doumalin, 2000].	60
3.3	Sélection d'un histogramme idéal pour la corrélation d'images [Doumalin, 2000].	63
3.4	Domaines d'intégration utilisés [Bornert, 1996].	63
3.5	Microstructure d'un réfractaire électro-fondu zircone-verre caractérisée par microtomographie [Madi, 2006]. Volume représenté : 350 x 350 x 700 μm^3 . (a) Segmentation du volume pour séparer les phases en présence. (b) Détection de l'isosurface, et triangulation. (c) Maillage obtenu (éléments tétraédriques linéaires, 1 500 000 degrés de liberté). La zircone est ici en rouge, et la phase vitreuse en jaune.	67

3.6	Champ de déformation axiale sur une surface libre après 5% de déformation macroscopique sur du cuivre OFHC. A gauche : champ expérimental. A droite : champ obtenu par calculs éléments finis, avec une microstructure représentative, un maillage libre fin respectant les joints de grains (130 818 nœuds), et des conditions aux limites de déformation homogènes aux contours [Musienko <i>et al.</i> , 2007].	67
3.7	Un exemple de microstructure générée permettant de décrire de manière réaliste la croissance de la structure bainitique. a) La microstructure réelle est analysée en surface grâce à l'EBSD. b) Des caractéristiques telles que la désorientation, la surface, ou le rapport de forme des grains sont déterminées. c) Une microstructure synthétique, dont la « cartographie EBSD » présente les mêmes caractéristiques que celle de la microstructure réelle, est générée. d) Dans la microstructure finale, la phase austénitique est représentée par des polyèdres de Voronoï, subdivisés afin de rendre compte de la microstructure bainitique. Des macles sont ensuite introduites. [Osipov et Cailletaud, 2006]	69
3.8	Génération d'une microstructure de type quasi-monophasé γ de TiAl à partir d'une surface expérimentalement connue [Hériprié, 2006].	72
3.9	Obtention des conditions aux limites à partir de mesures de champs de déplacements expérimentaux [Dexet, 2006].	72
4.1	Microgrille d'or déposée par microélectrolithographie à la surface de l'échantillon, et servant de marquage pour la corrélation d'images sous MEB. Le pas de la grille est de 4 μm . A gauche : grille avant essai. A droite : grille après 4 % de déformation en traction (photo prise en charge).	78
4.2	Schéma d'intégration utilisé pour le calcul des déformations.	78
4.3	Le schéma de localisation obtenu à l'issue des mesures de champs est complexe. En simplifiant la description, il est possible d'y considérer au moins trois échelles. Champ ici obtenu lors de la phase de traction du chargement « cisaillement puis traction à 0° ».	79
4.4	Superposition de la morphologie de la microstructure (joints de grains extraits de la cartographie EBSD) et du champ de déformation de von Mises. A gauche, cuivre OFHC de notre étude (chargement « cisaillement puis traction à 0° »). A droite, alliage de zirconium étudié par Doumalin [Doumalin, 2000].	81
4.5	Champs de déformation équivalente de von Mises, et covariogramme associé.	82
4.6	Champs de déformation équivalente de von Mises, et covariogramme associé.	83
4.7	Profils caractéristiques des covariogrammes pour les différents chargements. L'échelle spatiale est ici arbitraire. Il est possible de l'exprimer selon les dimensions de la zone analysée, ceci n'a pas été fait compte tenu de la difficulté de lecture des diagrammes.	84
4.8	(a) Photo de la machine de traction / compression / torsion <i>in situ</i> du LMS. (b) Géométrie de l'éprouvette de traction / compression prélevée dans une tôle de cuivre OFHC, laminée à chaud, de 14 mm d'épaisseur.	85
4.9	Représentation schématique de la consigne du chargement cyclique imposé.	87

4.10	Gradient du déplacement moyen sur la zone analysée, déduit du champ de déplacement mesuré par corrélation d'images. En bleu, la composante axiale, en rose et vert, les composantes hors diagonale, en rouge, la composante transverse.	89
4.11	Gradient du déplacement moyen sur la zone analysée, déduit du champ de déplacement mesuré par corrélation d'images. « Zoom » sur la composante transverse $F_{XX} - 1$.	89
4.12	Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images <i>in situ</i> en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta\epsilon_{22} = 2\%$). Surface observée : 280 μm x 440 μm . Cycle 2.	90
4.13	Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images <i>in situ</i> en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta\epsilon_{22} = 2\%$). 280 μm x 440 μm . Cycle 3.	91
4.14	Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images <i>in situ</i> en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta\epsilon_{22} = 2\%$). 280 μm x 440 μm . Cycle 4.	92
4.15	Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images <i>in situ</i> en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta\epsilon_{22} = 2\%$). 280 μm x 440 μm . Cycle 6.	93
4.16	Cartes de déformation transverse obtenues par corrélation d'images <i>in situ</i> en cours d'essai cyclique de traction-compression à déformation moyenne non nulle. L'état de référence est l'image 4. L'amplitude de chargement est donc ici représentée de façon relative ($\Delta\epsilon_{22} = 2\%$). 280 μm x 440 μm . Cycle 11.	94
4.17	Emplacement des zones observées localement dans le champ de déformation observé. (stade n°22 du chargement)	95
4.18	Superposition des champs de déformation équivalente de von Mises et des observations MEB de la localisation. Zone 1 : la localisation de la déformation suit les lignes de glissement intragranulaire. Zone 2 : la localisation s'effectue suivant les joints de grains, alors même que les lignes de glissement intragranulaire sont bien visibles. Pas de la grille : 2 μm .	95
4.19	Exemple de simulation de microstructure obtenue avec un modèle de type feuille morte à grains primaires constitués de polygones de Poisson.	96
4.20	Protocole d'extraction des données pour la génération de la surface de la microstructure représentative à partir de la cartographie expérimentale.	98
4.21	Procédure de détection des macles en surface afin de pouvoir leur appliquer un traitement volumique spécifique.	101
4.22	A gauche, cartographie de surface de la « phase mère » obtenue par extraction des macles de la cartographie EBSD. A droite, agrégat volumique généré pour décrire la phase mère.	102

4.23	Microstructure obtenue. Les grains sont non convexes, la dispersion de tailles de grains est respectée, et la présence de macles conservée.	103
4.24	Microstructure obtenue : présentation de l'intérieur de la microstructure.	104
5.1	Cellules de Voronoï schématisant une structure cristalline en 2D.	113
5.2	Schéma d'une structure bidimensionnelle périodique. Les seuls vecteurs de base ne suffisent pas à déterminer l'ensemble des points correspondants de cette cellule de base. Le point A admet A_1 et A_2 pour correspondant. A_1 se définit par translation du point A par le vecteur de base \underline{x} , tandis que le point A_2 s'obtient par translation du vecteur $(\underline{x} + \underline{y})$	114
5.3	Prédiction pour différents modèles réalisée par Gilormini en 1996 [Gilormini, 1996] : approche anisotrope sécante (AS) et tangente (AT), isotrope sécante (IS) ou tangente (IT), utilisant un milieu linéaire de comparaison (LC) ; comparée aux bornes supérieures (UB), de type Hashin et Shtrikman non linéaire, et de Reuss (RB).	122
6.1	Eprouvette de traction-compression. La double zone utile permet d'éviter le flambement tout en gardant un diamètre des têtes et une longueur globale compatible avec le montage.	128
6.2	Essai cyclique de traction-compression sur machine de type MTS avec contrôleur Testar 2S, d'une capacité statique de 100 kN, avec un groupe hydraulique de 20 $l.min^{-1}$	128
6.3	Courbe d'identification, par calculs éléments finis périodiques (voir chapitre 2 pour la méthode), de la loi monocristalline Méric-Cailletaud [Méric et Cailletaud, 1991].	130
6.4	Maillage tri-dimensionnel périodique utilisé pour la validation de l'identification par calcul éléments finis. La géométrie est composée de polyèdres de Voronoï non coupés. Le maillage respecte les joints de grains. Les éléments utilisés (c3d10) sont tétraédriques quadratiques.	131
6.5	Figures de pôles des textures expérimentale et discrète.	131
6.6	Distribution de la contrainte axiale : sans et avec correction de la trace du tenseur des contraintes.	133
6.7	Dispersion des courbes d'écrouissage en traction pour 40 réalisations différentes.	135
6.8	Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la distribution des contraintes en moyenne par phase.	135
6.9	Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la distribution des contraintes en moyenne par phase.	137
6.10	Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la distribution des déformations en moyenne par phase.	138
6.11	Impact du nombre de réalisations d'un calcul par éléments finis sur la validité de la prédiction du comportement de chaque phase.	140
6.12	Confrontation des courbes d'écrouissage obtenues macroscopiquement pour différentes transition d'échelles, sur un cycle complet avec la loi monocristalline phénoménologique cristalline de Méric et Cailletaud.	142

6.13	Distribution des contraintes axiales selon le stade de chargement (traction ou compression).	144
6.14	Distribution des déformations totales axiales selon le stade de chargement (traction ou compression).	145
B.1	(a) Schéma du glissement dévié d'une dislocation-vis : la dislocation passe du plan de glissement primaire A au plan de glissement primaire A', par l'intermédiaire du plan de glissement secondaire B. Le segment PP', dans le plan de glissement A', peut devenir une source de Frank-Read [Bailon et Dorlot, 2000]. (b) Glissement dévié dans l'aluminium raffiné ; $G=800$. [Jaoul, 1965]	180
B.2	Observation de glissement simple lors de nos essais, sur la tôle n°2 (laminée à chaud). Les joints de grains du polycristal se distinguent en limite des lignes de glissement, mettant en valeur les lignes de glissement simple sur plusieurs grains. La grille blanche qui apparaît sur les images est une microgrille d'or déposée à la surface de l'échantillon pour effectuer des mesures des champs par corrélation d'images. Observations effectuées sous microscope électronique à balayage, en électrons secondaires, à grossissement x200.	181
B.3	A droite : lignes de glissement dans un monocristal de cuivre orienté en glissement [François <i>et al.</i> , 1991].	181
B.4	Localisation des orientations idéales sur les principales figures de pôles. a) {111} b) {200} c) {220}.	182
B.5	Schéma du traitement thermomécanique industriel imposé.	184
B.6	Chauffage du lingot - Conception Griset.	184
B.7	Laminage à chaud - Conception Griset.	185
B.8	Laminage à froid - Conception Griset.	185
B.9	Ligne de dégraissage, recuit et décapage - Conception Griset.	186
B.10	Four cloche de recuit statique sous N_2 pendant 5 heures - Conception Griset.	186
C.1	Goniomètre de texture avec lequel les mesures ont été effectuées (LPTM - Université Paris13).	194
C.2	Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud, laminé à froid, recristallisé.	195
C.3	Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud, laminé à froid, et recristallisé. Une texture cube apparaît nettement.	196
C.4	Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud : en surface (figures du haut), et à cœur (figures du bas).	197
C.5	Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud. Analyse effectuée en surface de la tôle.	198
C.6	Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud. Analyse effectuée au cœur de la tôle.	198
C.7	Figure de pôles pour le cuivre laminé à chaud : mesures 1, 2, 3 et 4 (cette dernière correspond à l'intégrale des 3 autres).	200
C.8	Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 1. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée près de la surface.	201

C.9	Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 2. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée à cœur.	201
C.10	Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 3. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée près de l'autre surface.	202
C.11	Fonction de distribution des orientations pour le cuivre laminé à chaud : mesure 4. L'échantillon est prélevé dans le plan (DT,DN), et la mesure est effectuée avec une translation de l'échantillon sur lui-même, constituant ainsi une moyenne des mesures.	202
D.1	Principe de l'EBSD : formation d'une bande de Kikuchi sur l'écran phosphorescent.	207
D.2	Diagramme de Kikuchi associé à une orientation cristalline, et indexation de celui-ci.	208
D.3	Cartographie EBSD d'une surface d'1 mm^2 sur la tôle n°1, <i>i.e.</i> le cuivre laminé à chaud, puis à froid, et recristallisé (essai cisaillement-traction à 0°).	211
D.4	Cartographie EBSD d'une surface d'1 mm^2 sur la tôle n°2, <i>i.e.</i> le cuivre laminé à chaud uniquement (essai cyclique).	211
D.5	Représentation schématique d'une macule dans le réseau c.f.c. Le plan de la figure est le plan (110). Les plans A_1 et A_2 sont des plans de maillage [Baïlon et Dorlot, 2000].	212
D.6	Macules de croissance dans le cuivre [Jaoul, 1965].	212
D.7	Analyse de la cartographie EBSD effectué sur le cuivre laminé à chaud, sur une surface de 500 μm^2 . Allongement des grains (rapport du grand axe sur le petit axe de l'ellipse équivalente).	213
D.8	Analyse de la cartographie EBSD effectué sur le cuivre laminé à chaud, sur une surface de 500 μm^2 . Orientation morphologique des grains (en °).	213
E.1	Une droite du domaine spatial se traduit dans l'espace de Radon par un point. Les deux droites de l'image de gauche, qui est fortement bruitée, apparaissent sous la forme de deux points lumineux dans l'espace de Radon présenté à droite [Toft, 1996].	217
E.2	Droite dans le domaine spatial et dans l'espace de Radon [Barva, 2003].	218
E.3	Détection par transformée de Radon de toutes les droites de l'image d'une macule.	218

Principales notations et abréviations

AFM	Atomic Force Microscop
CFC	Cubiques à Faces Centrées
CRRET	Laboratoire « Croissance cellulaire, Réparation et Régénération Tissulaire »
EBSD	Electron Back Scattered Diffraction
F2Mmsp	Fédération Francilienne de Mécanique des Matériaux, Structures et Procédés
HARP	Heparin Affin Repairatory Peptid
MEB	Microscope Electronique à Balayage
VER	Volume Elémentaire Représentatif
ξ	Tenseur des déformations
$\mathbf{\tilde{E}}$	Tenseur des déformations macroscopiques
σ	Tenseur des contraintes
Σ	Tenseur des contraintes macroscopiques
E	Module d'Young
ν	Coefficient de Poisson
b	Norme du vecteur de Burgers

Index

B

Bandes de localisation ... voir Localisation

C

Calcul parallèle

conditions aux limites périodiques . 38,
41

découpage en sous-domaines 39

Chargement

cyclique. 85–88, 105, 127, 143, 152–154

non-proportionnel... 29–31, 33, 35, 51,
77, 79, 105, 152, 154

rochet..... 86–88, 105, 153, 154

Comportement monocristallin

loi de type phénoménologique .. 15, 18,
22–26, 42, 46, 127, 129, 152

loi de type quasi-physique .. 15, 18, 20,
21, 24–26, 42, 44, 152

Conditions aux limites

homogènes aux contours 113

périodiques..... 36, 38, 41, 112, 130

planéité des surfaces 114

Contrainte en éléments finis 133

Corrélation d'images

approximations, incertitudes .. 61, 62,
64, 65, 86, 87

coefficient de corrélation.... 59, 61, 62

marquage 58, 62, 78, 85

Covariogramme 79, 80

D

Diffraction des rayons X..... 29, 127

Durcissement 13–15, 17

Dynamique des dislocations 14, 15, 17, 18,
26, 46, 154, 156

E

EBSD .. 66, 68, 74, 77, 80, 96, 97, 99, 105,

153, 156

Ecrouissage

auto-écrouissage 13–15, 26

courbe d'..... 31, 142

latent .. 13–15, 18, 26, 46, 47, 152, 154

matrice d' 15

matrice d'..... voir aussi Interactions,
matrice

sur-écrouissage 30, 31, 152

Eshelby

problème d'..... 116

Essais

macroscopiques 127

sous MEB.. 29–31, 33, 77, 85, 86, 105,
154

Estimation voir Modèle

Évaluation des modèles 121–124, 142, 144,
147, 153, 154

F

Fédération Francilienne (F2Mmsp) 1

Formulation..... voir aussi Modèle

affine 34, 48, 49, 51, 119, 152

sécante 119

tangente..... 119

variationnelle..... 120

G

Glissement

dévié..... 14

lignes de 88, 155

systèmes de..... voir Systèmes

I

Identification(s)

écrouissage latent .. 13–15, 18, 26, 44,
46, 47, 152, 154

- antérieures*... 14, 15, 18, 22–24, 26, 45
méthode proposée... 33–36, 42, 51, 152
par couplage mesures de champs / calculs éléments finis..... 71, 73, 74
sous chargement cyclique..... 127, 129
- Interactions**
classement par force 14, 17, 18, 26, 46, 51
colinéaires . 13, 15, 26, 47, 48, 51, 152, 154
définition 13
dipolaires..... 13, 17, 154
matrice d' .. 15, 17, 18, 21–23, 45, 46, 51, 152
- J**
- Jonctions voir Interactions
- L**
- Localisation de la déformation
étape de 111
en faibles déformations 70, 71, 74
en grandes transformations..... 70
sous chargements cycliques 85–88, 105, 152–156
sous chargements non-proportionnels
 79, 105, 152, 154, 156
- M**
- Macles 96, 97, 99, 100, 102, 105, 153
 MEB voir aussi Corrélation d'images
bruit des images, dérive ... 64, 86, 155
instabilité électronique 59, 86, 155
 Mesures de champs . voir aussi Corrélation d'images
Superposition cartographie EBSD.. 77, 80
sous chargements cycliques 85, 86, 105, 152, 154
sous chargements non-proportionnels
 78, 79, 105, 152, 154
- Microstructure(s)
périodique..... 38, 39, 51, 130, 152
représentatives.. 66, 68, 74, 96, 97, 99, 100, 102, 105, 153, 156
- Milieu**
homogène équivalent..... 116
linéaire de comparaison 119–121
- Modèle**..... voir aussi Formulation
évaluation 121–124, 142, 144, 147, 153, 154
de Berveiller-Zaoui... 34, 36, 117, 140, 142, 144, 147, 152, 154
de Hill..... 117
de Kröner... 33, 48, 51, 116, 140, 142, 144, 147, 154
de Lin..... 115
de Sachs 33, 115
de Taylor..... 33, 115
règle en β 34, 35, 48, 51, 117, 140, 142, 144, 147, 152, 154
statique..... 115
- P**
- Périodicité**
conditions aux limites . 36, 38, 41, 112, 130
microstructure 38, 39, 51, 130, 152
- Perfect, projet européen 3
- Polyèdres de Voronoï
avec relation de périodicité 38, 39, 130
contraints..... 68, 96, 97, 102, 105
- Pression hydrostatique (éléments finis) 133
- R**
- Règle en β* voir Modèle
 Rochet 86–88, 105, 153–155
- S**
- Systèmes de glissement voir aussi Interactions
activation..... 30
définition des interactions..... 13
- T**
- Texture cristallographique 29, 38, 127, 130
 Trajets de chargement ... voir Chargement
 Transformée de Radon 99, 100

V

Verrous voir Interactions

Volume élémentaire représentatif . 36, 112–
114, 124, 135, 137, 140, 147, 153,
155

Voronoi voir Polyèdres de Voronoï

MESURES DE CHAMPS, ET IDENTIFICATION DE MODÈLES DE PLASTICITÉ CRISTALLINE

L'objet de ce travail est d'améliorer les techniques d'identification des lois de comportement multi-échelles des matériaux polycristallins cubiques à faces centrées. L'identification est en effet au cœur même de toute modélisation du comportement des matériaux.

Une méthode couplant calculs éléments finis et modèles en champs moyens est développée. La simulation de la réponse à des chargements non-proportionnels, et la confrontation aux réponses expérimentales d'un cuivre OFHC, permet de mettre l'accent sur la description de l'écrouissage latent, et aboutit à une meilleure prise en compte des interactions entre systèmes de glissement.

Des mesures de champs sous microscope électronique à balayage sont réalisées au cours d'essais in situ sous chargements non-proportionnels. Les champs locaux de déformation obtenus par microextensométrie permettent d'analyser l'apparition et l'évolution des structures de localisation. Une microstructure synthétique tridimensionnelle représentative est développée à partir des cartographies EBSD dans le but d'une confrontation entre champs expérimentaux et calculs par éléments finis.

Enfin, une évaluation numérique des prévisions de plusieurs modèles en champs moyens est abordée, à l'échelle des états moyens par phase, par confrontation aux calculs éléments finis périodiques. Elle s'appuie sur une définition du volume élémentaire représentatif à l'échelle globale, en distribution de phases, et par phase.

Cette étude permet de poser un regard novateur sur les méthodes d'identification de modèles en champs moyens reposant sur une confrontation à l'échelle macroscopique, et met en évidence les difficultés potentielles d'une approche qui viserait à s'appuyer également sur des états plus locaux.

Mots-clé : écrouissage latent, localisation de la déformation, homogénéisation, identification, mesures de champs, calculs parallèles, simulation de microstructure.
